



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
LICENCIATURA EM FÍSICA**

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS
ANISOTRÓPICOS**

ACARAPE - CE

2019

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS ANISOTRÓPICOS

Trabalho de Conclusão de Curso, apresentado à Coordenação do Curso de Licenciatura em Física, da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial para a obtenção do Título de Licenciado em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Albuquerque, Ismael da Graça.

A298t

Transporte Eletrônica em Sistemas Bidimensionais Anisotrópicos /
Ismael da Graça Albuquerque. - Redenção, 2019.
49f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto De Ciências Exatas E Da
Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira, Redenção, 2019.

Orientador: Silvia Helena Roberto de Sena.

1. Física - Sistemas bidimensionais. 2. Anisotropia. 3.
Transporte Eletrônico. I. Título

CE/UF/BSCA

CDD 530

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS ANISOTRÓPICOS

Trabalho de Conclusão de Curso, apresentado à Coordenação do Curso de Licenciatura em Física, da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial para a obtenção do Título de Licenciado em Física.

Aprovada em 11/07/2019.

BANCA EXAMINADORA

Silvia Helena R. de Sena

Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena -
Orientadora

Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Wellisson Pires Lima

Wellisson Pires Lima

Universidade Federal do Ceará (UFC)

Diego Rabelo da Costa

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

A Deus, minha família e namorada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao meu bondoso Deus, por me guiar e proteger durante essa grande jornada.

Em segundo, quero agradecer a minha família, em especial aos meus pais Eleuzo e Clébia que me deram amor, carinho, incentivo e estiveram cada segundo da minha vida ao meu lado, nos momentos difíceis e felizes.

Agradeço também aos meus cinco irmãos Ramires, Juarez, Lucas, Nazareno, Eleuzo Filho que sempre me apoiaram, incentivaram nos meus estudos e foram as pessoas que me espelhei durante toda a minha vida.

Também sou profundamente grato as minhas duas irmãs Juvenilia e Maria que estiveram firmes, desde jovens, ajudando a mim, os meus irmãos e os meus pais, a sustentarem a casa, trabalhando muito para que hoje eu possa me formar.

Sou grato a minha namora e futura esposa Sybele Lanuccy que neste último ano esteve do meu lado me dando apoio, incentivo e conforto nos momentos que estive triste.

Agradeço aos meus grandes amigos que fiz durante a minha graduação, em especial Joel, Mateus, Bianca, Fernades e Rogelandio por formarem essa equipe incrível que esteve unida durante todo esse tempo e sempre ajudando um ao outro.

Sou grato a todos os professores da Unilab por serem dedicados, dispostos a ajudar e guiar os seus alunos.

Quero agradecer principalmente aos meus professores de física: Prof. Dr. Philipe por ter estado na maior parte da minha graduação, Profa. Dra. Cinthia pela sua gentileza nas disciplinas e ao Prof.Dr. Michel por me ter aceito no seu grupo de astronomia.

Agradeço especialmente a minha orientadora Profa. Dr. Silvia Helena Roberto de Sena que me guiou com muita paciência e dedicação durante todo esse tempo e tem sido uma professora muito importante para a minha graduação. Eu aprendi muito com a senhora e só tenho a agradecer.

Sou grato ao Wellisson Pires Lima e ao Prof.Dr. Diego Rabelo da Costa por aceitarem compor a Banca Examinadora do meu TCC.

Por fim, quero agradecer a toda UNILAB , juntamente com os seus funcionários, pois sem eles essa grandiosa universidade não poderia se sustentar e eu não teria essa maravilhosa experiência.

“Logic Can Get You From A to B; Imagination
Can Get You Anywhere.”

(Albert Einstein)

RESUMO

Anisotropia está presente em vários sistemas e, dependendo dos materiais com os quais estamos lidando, tal característica pode ter influência em propriedades fundamentais, tais como massa efetiva, velocidade de grupo e níveis de energia em nanoestruturas, o que por sua vez se manifestam nas propriedades óptico-eletrônicas de tais materiais. O presente trabalho tem como objetivo principal investigar como a anisotropia da dispersão eletrônica afeta as propriedades de transporte eletrônico de um material bidimensional. Para estudar este problema, usamos a teoria da massa efetiva para resolver a versão anisotrópica bidimensional (2D) da equação de Schrodinger e analisar a dependência angular, ou direcional, da transmissão eletrônica através de uma barreira quadrada de potencial arbitrariamente orientada. Como consequência da anisotropia, descobrimos que a direção de propagação dada pela velocidade de grupo não coincide com a direção do vetor de onda, levando a uma nova definição da corrente de probabilidade, que retorna à convencional quando removemos a anisotropia. Posteriormente calculamos o espectro de energia para uma super-rede gerada por uma sequência de barreiras quadradas de potencial e observamos que a largura das bandas de energia varia com a orientação da super-rede. Em seguida, utilizamos o método da matriz de transferência para investigar analiticamente a transmissão eletrônica através de barreiras duplas, tendo, logo após, desenvolvido a aplicação numérica do mesmo método para obtenção das bandas de transmissão para o caso de múltiplas barreiras. Vale mencionar que para obtenção de todos os resultados numéricos utilizamos os dados das massas eletrônicas efetivas do fosforeno nas direções *armchair*, tomada ao longo do eixo x , e *zigzag*, ao longo do eixo y .

Palavras-chave: Sistemas bidimensionais. Anisotropia. Transporte Eletrônico.

ABSTRACT

Anisotropy is present in several systems and, depending on the materials which we are dealing with, this characteristic may have influence on fundamental properties, such as effective mass, group velocity and energy levels in nanostructures, which turn to be manifested in the optical-electronic properties of such materials. The present work has the main goal to investigate how the anisotropy of the electronic dispersion affects the electronic transport properties of a two dimensional material. In order to approach this problem, we use the effective mass theory to solve the two-dimensional (2D) anisotropic version of the Schrodinger's equation and analyze the angular or directional dependence of the electronic transmission through an arbitrarily oriented square potential barrier. As a consequence of the anisotropy, we find that the direction of propagation given by the group velocity does not coincide with the direction of the wave vector, leading to a new definition of the probability current, that returns to the conventional one when we remove the anisotropy. We then calculate the energy spectrum for a superlattice generated by a sequence of square potential barriers and observe that the bandwidth of the energy bands varies with the orientation of the superlattice. Next, we use the transfer matrix method to investigate analytically the electronic transmission through double barriers and we also develop the numerical application of the same method to obtain the transmission bands in the case of multiple barriers. It is worth mentioning that in order to obtain all the numerical results we use the data of the phosphorene's electronic effective masses in the directions armchair, taken along the x axis, and zigzag, along the y axis.

Keywords: Bidimensional Systems. Anisotropy. Eletronic Transport.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação esquemática do potencial nos dois sistemas de coordenadas. .	15
Figura 2 – Espectro de energia com $m_x = 0,166m_0$, $m_y = 0,846m_0$ para os casos (a) $\alpha = 0$ e (b) $\alpha = \pi/4$	17
Figura 3 – Visualização geométrica das direções de \mathbf{k} e \mathbf{v}_g sobre uma curva de energia constante para $\alpha = \pi/6$	18
Figura 4 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ . À esquerda temos o gráfico para uma inclinação da barreira de potencial $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$, enquanto à direita podemos observar os casos de inclinação $\alpha = 60^\circ$ e $\alpha = 30^\circ$. Os parâmetros utilizados foram $a = 10$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV.	27
Figura 5 – Visualização da direção da velocidade de grupo e das regiões de ϕ positivo e negativo.	27
Figura 6 – Transmissão eletrônica em função do angulo de inclinação α da barreira para incidência frontal $\phi = 0$. Os parâmetros utilizados foram $a = 10$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV.	28
Figura 7 – Transmissão eletrônica em função da energia do elétron para incidência frontal com $\alpha = 0$ (curva sólida preta), $\alpha = 90^\circ$ (curva tracejada vermelha) e $a = 10$ nm.	29
Figura 8 – Condutância em função de α através de uma barreira de largura 10 nm e altura de 100 meV.	31
Figura 9 – Representação da barreira de potencial.	32
Figura 10 – Representação geométrica da função $f(E)$, onde o ângulo $\phi = 0$ e a energia varia para inclinações da barreira: $\alpha = 0$, $\alpha = \pi/2$ e $\alpha = \pi/3$ respectivamente. Os parâmetros utilizados foram $V_0 = 100$ meV, $a = 10$ nm e $b = 5$ nm.	35
Figura 11 – Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma sequência de barreiras (SENA, 2018).	35
Figura 12 – Representação do sistema de eixo roracionado para dupla barreira de potencial.	38

- Figura 13 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ para dupla barreira de potencial. À esquerda temos o gráfico para uma inclinação da barreira de potencial $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi/2$. Na direita podemos observar os casos de inclinação $\alpha = \pi/3$ e $\alpha = \pi/6$. Os parâmetros utilizados foram $a = 20\text{nm}$, $E = 150\text{meV}$ e $V_0 = 100\text{meV}$ 41
- Figura 14 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ e inclinação $\alpha = \pi/2$. Na parte de cima temos o gráfico com 10 barreiras de potencial quadrado e embaixo podemos observar o caso de 15 barreiras. Os parâmetros utilizados foram $a = 20\text{ nm}$, $E = 150\text{ meV}$ e $V_0 = 100\text{ meV}$ 42
- Figura 15 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de inclinação α da barreira para colisões frontais de ângulo $\phi = 0$. À esquerda temos o gráfico com 10 barreiras de potencial quadrado e na direita podemos observar o caso de 15 barreiras. Os parâmetros utilizados foram $a = 20\text{ nm}$, $E = 150\text{ meV}$ e $V_0 = 100\text{ meV}$ 42
- Figura 16 – As figuras apresentam o gráfico da condutância em função do ângulo de inclinação α . Na esquerda temos a representação para 1 e 2 barreiras de potencial e para 5, 10 e 15 barreiras na direita. Os parâmetros utilizados foram $a = 10\text{ nm}$, $b = 5\text{ nm}$ e $V_0 = 100\text{ meV}$ 43

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADM	Ácido Desoxirribonucléico
EDO	Equação Diferencial Ordinária
ES	Equação de Schrodinger
OLEDs	Organic Light-Emitting Diode

LISTA DE SÍMBOLOS

m_x	Massa na direção x
m_y	Massa na direção y
H	Hamiltoniano
E	Energia
V	Potencial
P_x	Momento linear na direção x
P_y	Momento linear na direção y
α	Ângulo de inclinação da barreira de potencial
V_g	Velocidade de grupo
k	Vetor de onda
\hbar	Constante de Planck reduzida
Ψ	Função de onda
ρ	Densidade de probabilidade
J	Densidade de Corrente de probabilidade
T	Transmissão eletrônica
R	Coefficiente de reflexão
a	Largura da barreiras
b	Distância entre as barreiras
I	Corrente de probabilidade
U	Diferença de potencial
e	Carga do elétron
G	Condutância
N	Matriz de transferência

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	SISTEMAS ANISOTRÓPICOS BIDIMENSIONAIS	17
2.1	Equação de Schrodinger Anisotrópica Em Duas Dimensões	17
2.2	Corrente de probabilidade e a equação da continuidade	21
2.2.1	<i>Sistema bidimensional isotrópico</i>	22
2.2.2	<i>Sistema bidimensional anisotrópico</i>	24
2.3	Continuidade na derivada da função de onda	25
2.4	Tunelamento	26
2.5	Condutância	31
3	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM REDE DE BARREIRAS DE POTENCIAL	34
3.1	Estrutura de bandas de uma super-rede unidimensional	34
3.2	Método da matriz de transferência	37
3.2.1	<i>Transporte eletrônico para barreira dupla</i>	40
3.2.2	<i>Transporte eletrônico para múltiplas barreiras de potencial</i>	43
4	CONCLUSÕES	46
	REFERÊNCIAS	47

1 INTRODUÇÃO

As propriedades de um sistema podem variar de acordo com a direção do espaço considerada, dando origem a direções privilegiadas. Em contraposição com a isotropia, que indica a independência direcional, essa dependência das grandezas físicas com a orientação espacial é chamada de anisotropia. A isotropia está intimamente relacionada com as propriedades de conservação de um sistema físico. Se dissermos que o espaço é isotrópico estaremos afirmando que a escolha arbitrária do eixo coordenado não influencia nas propriedades físicas do sistema, portanto a sua lagrangeana torna-se invariante sob rotações e conseqüentemente o momento angular deve ser conservado (MARRION; THORNTON, 2003). Desse modo, podemos observar que a isotropia espacial admite uma importância significativa para a existência de uma das leis de conservação na física.

A anisotropia pode se manifestar, por exemplo, na massa dos portadores de carga dos materiais (G.D.CHEN, 1995; C.IL-TONG, 1973; G.RUDIGER, 2019), no transporte eletrônico (MOSCHETTI, 2010; MORRISON; MYRONOV, 2017; FANG.C, 2016) e nos níveis de energia (K.MIYUKIM; P.BENNETT, 2009). É interessante ressaltar que existem materiais que admitem características anisotrópicas e isotrópicas simultaneamente, dependendo apenas das propriedades do corpo que estamos tratando, como é o caso dos quasicristais (GONG, 2006). Como exemplos específicos de materiais onde a anisotropia está presente, pode-se citar o óxido de Gálio, que exibe anisotropia na sua condutividade dependendo da direção que estamos considerando (ZHI; AMIT, 2015), bem como as nanopartículas de ouro (Au), que, por sua vez, apresentam as chamadas anisotropia magnética, tendo uma direção privilegiada para a magnetização espontânea (YUN; S.PO-HSUN, 2009). Outra área onde a ideia de anisotropia vem ganhando espaço desde a década de 40 do século passado é a cosmologia, onde se tem buscado explicações para fenômenos astronômicos, tais como o da rotação de galáxias (MENESES, 2015), através de conceitos anisotrópicos.

Uma outra característica que tem influência direta nas propriedades físicas de um sistema é a sua dimensionalidade. Do ponto de vista de propriedades eletrônicas de um determinado material, o número de dimensões espaciais ao qual os elétrons estão confinados podem alterar drasticamente sua capacidade condutora, por exemplo. Chamamos de sistemas de baixa dimensionalidade àqueles onde o movimento das partículas sofre uma restrição em uma ou mais dimensões. Dessa forma, podemos ter um gás de elétrons bidimensionais (2D), nanofios ou nanofitas (1D) e pontos quânticos (0D) (NOVOSELOVE, 2005; RITTER; LYDING, 2008;

EZAWA, 2006).

O apelo de se estudar sistemas de baixa dimensionalidade é compactar o máximo possível os equipamentos eletrônicos, aumentando o seu desempenho e reduzindo os custos de produção. Materiais bidimensionais têm ganhado uma grande parte do mercado tecnológico e melhorado o desempenho de computadores, televisões e baterias, por apresentar propriedades bastante úteis de condutores e serem extremamente finos e maleáveis como, por exemplo, o grafeno que pode ser utilizado para a criação de micro antenas, fotodetectores, moduladores ópticos ou OLEDs (ANKIT, 2016). Podemos citar também o óxido de Gálio que apresenta aplicações tecnológicas voltadas para a eletroluminescência como display eletroluminescente de filme fino, painéis de plasma, lâmpadas fluorescentes e muitas outras aplicações. Também temos as nanofitas de ouro que, por sua vez, podem ser utilizadas para detecção química e biológica, optoeletrônica, terapia térmica com foto imagem biomédica e rotulagem de ácido desoxirribonucléico (ADN) (R.RASHIDI, 2014) dentre outras. Mais recentemente temos os filmes finos de fósforo negro que apresentam grande aplicabilidade em baterias lítio, manganês, enxofre, dentre outros (SHUXING; KWAN, 2018; ANTONIO; VITTORIO, 2017).

Podemos observar que as nanoestruturas apresentam um leque de propriedades que são imperativas na criação da maioria dos aparelhos eletrônicos dos dias de hoje. Percebe-se que a dimensionalidade e a anisotropia são características que influenciam significativamente as propriedades de transportes eletrônicos dessas estruturas. Deste modo iremos buscar apresentar um estudo sobre as influências da anisotropia no transporte eletrônico de um sistema bidimensional. Para atingir tais objetivos, o trabalho está dividido da seguinte maneira. No capítulo seguinte iremos, inicialmente, usar a teoria da massa efetiva proposta na referência (CUNHA, 2017) para estudar a Equação de Schrodinger (ES) bidimensional anisotrópica, bem como propriedades diretamente relacionadas a ela, verificando a influência da anisotropia na definição da corrente de probabilidade. Ainda neste capítulo iremos investigar o tunelamento eletrônico através de uma barreira de potencial arbitrariamente orientada no plano xy e calcular a dependência da condutância como função da orientação da barreira de potencial. No capítulo 3 vamos calcular o espectro eletrônico produzido pela presença de uma super-rede de barreiras de potencial quadrada e investigar o efeito da orientação dessa rede na estrutura de bandas. Finalmente apresentaremos e aplicaremos o método da matriz de transferência para calcular numericamente a transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras. Vale ressaltar que para a obtenção dos resultados numéricos iremos utilizar as massas efetivas do fosforeno ao longo

das direções *armchair* (x) e *zigzag* (y) como calculadas na referência (LIMA, 2018). A saber tomaremos $m_x = 0,166m_0$ e $m_y = 0,846m_0$, onde m_0 é massa do elétron.

2 SISTEMAS ANISOTRÓPICOS BIDIMENSIONAIS

Neste capítulo estudaremos o comportamento da ES bidimensional anisotrópica, onde a massa do elétron varia com sua direção de propagação. Em particular, estamos interessados no comportamento do elétron sujeito a uma barreira de potencial quadrada orientada em uma direção qualquer do espaço bidimensional. A partir de agora, investigaremos em detalhe quais as influências de tal anisotropia na definição da corrente de probabilidade e, conseqüentemente, do coeficiente de transmissão.

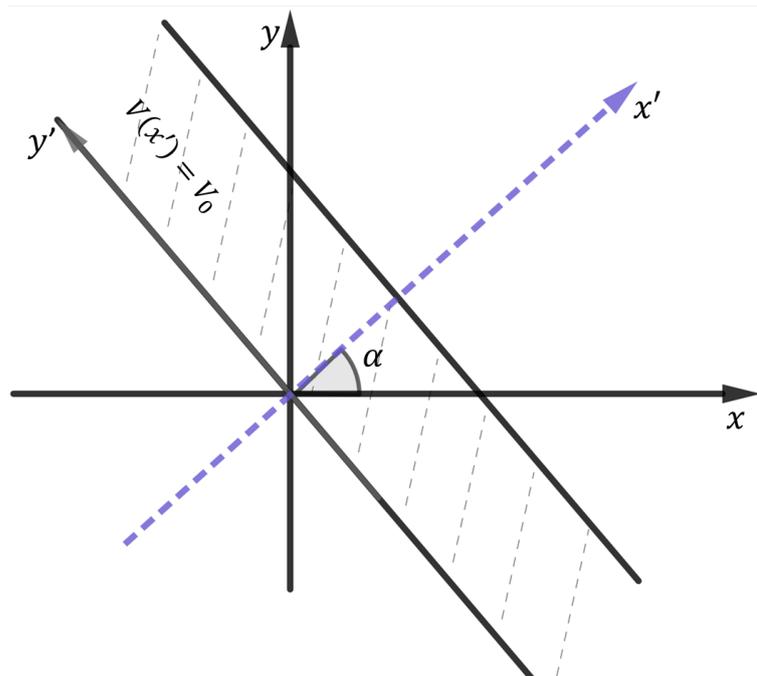
2.1 Equação de Schrodinger Anisotrópica Em Duas Dimensões

Nesse momento consideraremos o hamiltoniano H de um elétron no espaço bidimensional anisotrópico sujeito a um potencial $V(\mathbf{r})$, tal que

$$H = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + V(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde m_x e m_y são as massas da partícula nas direções x e y , respectivamente.

Figura 1 – Representação esquemática do potencial nos dois sistemas de coordenadas.



A partir de agora analisaremos o caso em que o potencial $V(\mathbf{r})$ é uma barreira quadrada arbitrariamente orientada no plano xy , que será, em geral, função de x e y . No entanto,

se fizermos uma rotação no sistema de eixos por um α , de forma que o novo eixo x' coincida com a direção perpendicular à barreira, como representado na Fig.1, iremos ser capazes de reduzir um problema bidimensional a uma dimensão.

No sistema rotacionado, o potencial depende apenas de x' , sendo dado por

$$\begin{cases} V(x') = 0, & \text{se } x' < 0 \\ V(x') = V_0, & \text{se } 0 < x' < a \\ V(x') = 0, & \text{se } x' \geq a \end{cases} \quad (2.2)$$

Podemos escrever p_x e p_y em função de p'_x e p'_y da seguinte forma

$$p_x = p'_x \cos \alpha - p'_y \sin \alpha, p_y = p'_x \sin \alpha + p'_y \cos \alpha. \quad (2.3)$$

Substituindo a Eq. (2.3) na Eq. (2.1), obtemos

$$H = \frac{p'_x{}^2}{2\mu_x} + \frac{p'_y{}^2}{2\mu_y} + \frac{p'_y p'_x}{\mu} + V(x', y'), \quad (2.4)$$

onde

$$\frac{1}{\mu_x} = \frac{\cos^2 \alpha}{m_x} + \frac{\sin^2 \alpha}{m_y}, \quad (2.5)$$

$$\frac{1}{\mu_y} = \frac{\sin^2 \alpha}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha}{m_y}, \quad (2.6)$$

$$\frac{1}{\mu} = \left(\frac{1}{m_y} - \frac{1}{m_x} \right) \sin \alpha \cos \alpha. \quad (2.7)$$

Observe que a Eq. (2.4) representa uma elipse rotacionada no espaço dos momenta p'_x e p'_y . Para provarmos isso basta lembrarmos da equação geral de uma cônica que é dada por

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0. \quad (2.8)$$

As cônicas descritas por essa equação podem ser classificadas em termos do valor do discriminante $B^2 - 4AC$ nos seguintes casos:

- Uma elipse se $B^2 - 4AC < 0$;
- Uma parábola se $B^2 - 4AC = 0$;
- Uma hipérbole se $B^2 - 4AC > 0$.

No presente caso temos que $x \rightarrow p_x$ e $y \rightarrow p_y$, com

$$A = \frac{1}{2\mu_x}, \quad (2.9)$$

$$B = \frac{1}{\mu}, \quad (2.10)$$

$$C = \frac{1}{2\mu_y}, \quad (2.11)$$

$$D = E = 0, \quad (2.12)$$

$$F = V - H. \quad (2.13)$$

Usando as definições de μ , μ_x e μ_y dadas anteriormente, obtemos

$$4AC = \frac{(m_x^2 + m_y^2)\sin^2\alpha\cos^2\alpha + m_x m_y(\cos^4\alpha + \sin^4\alpha)}{m_x^2 m_y^2}, \quad (2.14)$$

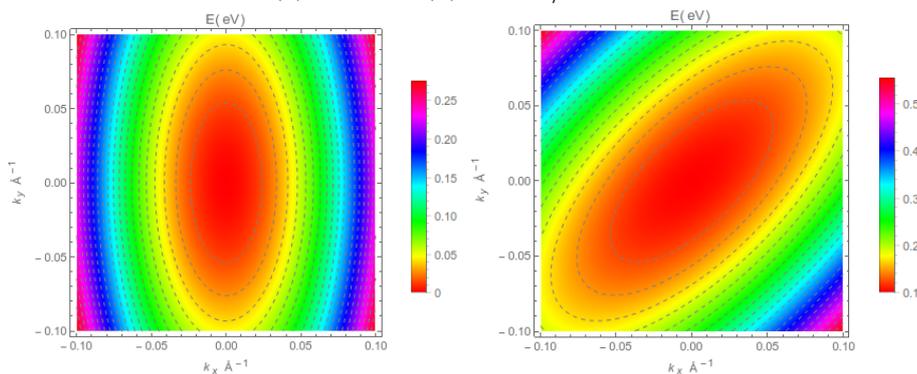
$$B^2 = \frac{(m_x^2 + m_y^2)\sin^2\alpha\cos^2\alpha - 2m_x m_y \cos^2\alpha \sin^2\alpha}{m_x^2 m_y^2}. \quad (2.15)$$

Assim, comparando as Eqs. (2.15) e (2.14) fica claro que

$$B^2 < 4AC. \quad (2.16)$$

Portanto as curvas com energia constante são representadas por elipses rotacionadas.

Figura 2 – Espectro de energia com $m_x = 0,166m_0$, $m_y = 0,846m_0$ para os casos (a) $\alpha = 0$ e (b) $\alpha = \pi/4$.



Na Fig.2 estão representadas as curvas de nível para energia de um elétron livre em uma monocamada de fosforeno, onde as diferentes cores indicam energias variando de zero (vermelho) a 250 meV (rosa pink). O painel esquerdo corresponde ao caso $\alpha = 0$, enquanto do lado direito, representa o caso rotacionado por $\alpha = \frac{\pi}{4}$.

É interessante ressaltar que aqui, diferentemente do caso isotrópico, a velocidade de grupo \mathbf{v}_g do elétron não é paralela ao vetor de onda \mathbf{k} . Para demonstrar isso, basta lembrar que a velocidade de grupo é definida como

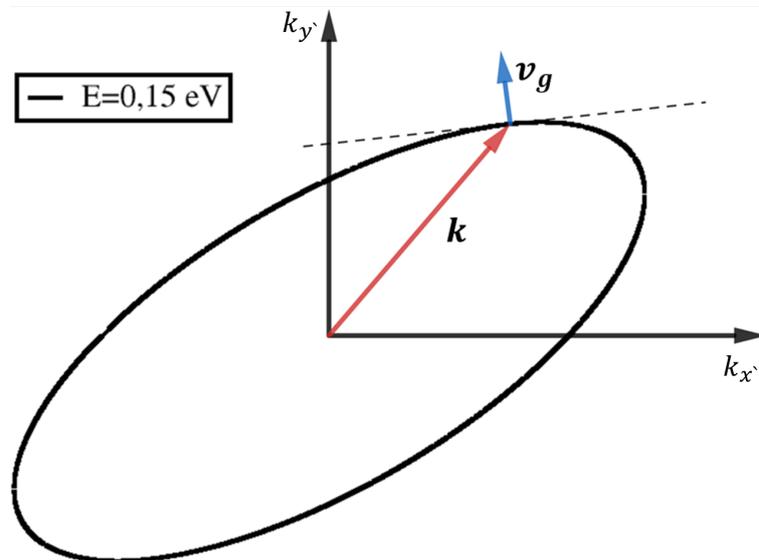
$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}'} H. \quad (2.17)$$

Usando a definição de H dada pela Eq. (2.4), temos que

$$\mathbf{v}_g = \hbar \left[\left(\frac{k'_x}{\mu_x} + \frac{k'_y}{\mu} \right) \hat{x} + \left(\frac{k'_y}{\mu_y} + \frac{k'_x}{\mu} \right) \hat{y} \right]. \quad (2.18)$$

A Eq. (2.18) nos mostra analiticamente a diferença entre a direção de propagação do elétron e o vetor de onda. Uma forma de visualizar a direção de \mathbf{v}_g no espaço dos momenta é lembrar que o gradiente de uma função escalar é sempre perpendicular às curvas de nível dessa função. Dessa forma, como as curvas de energia constante são elipses, o vetor velocidade de grupo estará sempre perpendicular a elas, como mostrado na Fig. 3.

Figura 3 – Visualização geométrica das direções de \mathbf{k} e \mathbf{v}_g sobre uma curva de energia constante para $\alpha = \pi/6$.



Agora queremos determinar a equação que descreve a função de onda para um elétron se propagando através de uma barreira de potencial, onde sabemos que o momento pode ser escrito em termos de um operador diferencial, de forma que

$$p'_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \quad \text{e} \quad p'_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y'}. \quad (2.19)$$

Assim a ES anisotrópica assume a seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{x'}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x'^2}(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{y'}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y'^2}(\mathbf{r}, t) - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x' \partial y'}(\mathbf{r}, t) + V(x') \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.20)$$

Como o potencial é independente do tempo, sabemos que as autofunções serão estados estacionários, cuja dependência temporal é conhecida. Além disso, V depende apenas da variável espacial x' , logo a dependência da função de onda em y' deve ser dada pelas autofunções do operador $p_{y'}$. portanto podemos escrever

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(x') e^{ik_y y'} e^{-i\omega t}, \quad (2.21)$$

com $\omega = E/\hbar$. Substituindo a Eq.(2.21) na Eq.(2.20) reduzimos nosso problema à resolução da seguinte equação diferencial ordinária (EDO)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \frac{d^2\varphi(x')}{dx'^2} - \frac{i\hbar^2}{\mu} k_y' \frac{d\varphi(x')}{dx'} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2\mu_y} \varphi(x') + V(x')\varphi(x') = E\varphi(x'). \quad (2.22)$$

Para determinar a solução da Eq.(2.22), que se trata de uma EDO com coeficientes constantes, devemos supor uma solução do tipo exponencial $\varphi = e^{ik_x x'}$. Com essa suposição obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_x} k_x'^2 + \frac{\hbar^2 k_y'}{\mu} k_x' + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2\mu_y} = E - V. \quad (2.23)$$

Resolvendo a equação acima para k_x' encontramos:

$$k^\pm = \beta \pm \gamma, \quad (2.24)$$

com β e γ definidos por

$$\beta = -\frac{\mu_x k_y'}{\mu}, \quad (2.25)$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2(E - V_0)\mu_x}{\hbar^2} + \left(\frac{\mu_x^2}{\mu^2} - \frac{\mu_x}{\mu_y}\right) k_y'^2}. \quad (2.26)$$

Vale a pena salientar que, contraintuitivamente, uma onda se propagando com $k_{x'} = k^+$ da esquerda pra direita, quando refletida pela barreira de potencial, não terá simplesmente a componente $k_{x'}$ invertida, mas se propagará para a esquerda com $k_{x'} = k^- \neq -k^+$. Esse fato também pode ser visualizado na Fig. 3, pois para um dado valor de k_y' os valores de $k_{x'}$ não são simétricos em relação ao eixo vertical.

2.2 Corrente de probabilidade e a equação da continuidade

A finalidade desta seção é analisar o efeito da anisotropia na definição de corrente de probabilidade e verificar se as definições dos coeficientes de transmissão e reflexão são alteradas.

Primeiramente, faremos uma pequena revisão do caso usual, que aqui chamaremos de isotrópico, e, em seguida, deduziremos um caso mais geral partindo do hamiltoniano anisotrópico.

2.2.1 Sistema bidimensional isotrópico

Iniciaremos analisando a definição usual da corrente de probabilidade para sistemas isotrópicos. Para tanto, devemos lembrar que a mecânica quântica afirma que a probabilidade de se encontrar uma partícula em uma região do espaço é conservada. Uma forma de chegarmos nessa lei da conservação é calcularmos a derivada temporal da densidade de probabilidade $\rho = |\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$. Assim,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right]. \quad (2.27)$$

Sabendo que a derivada temporal da função de onda é dada pela ES como

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{i}{\hbar} V(x, y, z) \Psi(x, t). \quad (2.28)$$

Então a variação temporal da densidade de probabilidade torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2im} [\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*] \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2im} \Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \frac{\hbar^2}{2im} \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right], \end{aligned} \quad (2.29)$$

ou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.30)$$

onde

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \nabla \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \Psi \nabla \Psi^*. \quad (2.31)$$

A Eq. (2.30) é chamada de equação de continuidade que estabelece a conservação local da probabilidade. Semelhante à interpretação no eletromagnetismo, podemos ver \mathbf{J} como uma corrente de probabilidade. Se entendermos $T(R)$ como a probabilidade das partículas serem transmitidas (refletidas) de uma região a outra do espaço em uma determinada direção definida pelo vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$, podemos definir

$$T = \frac{[J_{\text{saída}}]_{\hat{\mathbf{n}}}}{[J_{\text{entrada}}]_{\hat{\mathbf{n}}}} \quad (2.32)$$

e

$$R = \frac{[J_{\text{refletido}}]_{\hat{\mathbf{n}}}}{[J_{\text{entrada}}]_{\hat{\mathbf{n}}}}. \quad (2.33)$$

Tratando o caso mais simples da barreira de potencial ao longo da direção x , podemos escrever as soluções da ES nas três regiões de potencial da seguinte forma

$$\Psi_j(x, y, t) = e^{ik_y y} [A_j e^{i(k_j x - \omega t)} + B_j e^{-i(k_j x + \omega t)}], \quad (2.34)$$

em que $j = 1, 2, 3$ indica em qual região do espaço estamos interessados, $\omega = E/\hbar$, k_x e k_y estão relacionados à energia da partícula pela equação

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + V_j. \quad (2.35)$$

Observe que $k_1 = k_3$, pois as regiões 1 e 3 possuem $V(x) = 0$. Além disso, $B_3 = 0$, pois não existe onda refletida na última região. Agora podemos escrever a corrente de probabilidade na direção x como

$$J_x = \frac{\hbar}{2im} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right] \quad (2.36)$$

$$= \frac{1}{m} \text{Re} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\hbar}{i} \Psi^* \right]. \quad (2.37)$$

Assim, substituindo a Eq.(2.34) na equação acima obtemos as seguintes expressões para a componente x da corrente de probabilidade nas regiões 1 e 3:

$$J_1^x = \frac{\hbar}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) k_1, \quad (2.38)$$

$$J_3^x = \frac{\hbar}{m} |A_3|^2 k_1. \quad (2.39)$$

Note que podemos associar a parte positiva de J_1^x à corrente que incide na barreira de potencial, enquanto a parte negativa está associada à corrente refletida, já J_3^x corresponde puramente à corrente transmitida. Dessa forma, podemos utilizar as definições dadas nas Eqs.(2.32) e (2.33) para escrever os coeficientes de transmissão e reflexão como

$$T = \left| \frac{B_3}{A_1} \right|^2, \quad (2.40)$$

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2, \quad (2.41)$$

sendo o resultado utilizado comumente pelos livros acadêmicos .

2.2.2 Sistema bidimensional anisotrópico

Nessa seção queremos encontrar a equação geral da corrente de probabilidade válida para um sistema anisotrópico descrito pelo hamiltoniano da Eq.(2.4). Em seguida vamos usar novamente o problema da barreira de potencial quadrada como modelo, mas dessa vez, assumiremos uma orientação arbitrária no plano xy definida pelo ângulo α .

Utilizaremos o mesmo método da seção anterior, avaliando a derivada temporal da função de onda a partir da ES com o novo Hamiltoniano anisotrópico da Eq.(2.4). Dessa forma, obtemos

$$i\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x'^2} \Psi^* - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x'^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y'^2} \Psi^* - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial y'^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x' \partial y'} \Psi^* - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x' \partial y'} \right). \quad (2.42)$$

Podemos reescrever a equação acima de uma forma mais sugestiva como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x'} \left[\frac{1}{\mu_x} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x'} \right) + \frac{1}{\mu} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y'} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y'} \left[\frac{1}{\mu_y} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y'} \right) + \frac{1}{\mu} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x'} \right) \right]. \quad (2.43)$$

Portanto, para que a equação da continuidade permaneça válida, as componentes da corrente de probabilidade ficam definidas por

$$J_x = \frac{1}{\mu_x} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x'} \right) + \frac{1}{\mu} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y'} \right), \quad (2.44)$$

$$J_y = \frac{1}{\mu_y} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y'} \right) + \frac{1}{\mu} \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x'} \right). \quad (2.45)$$

Para o caso de um potencial unidimensional qualquer que dependa exclusivamente de x' a função de onda, como explicado anteriormente, é dada por

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y'} \Phi(x'). \quad (2.46)$$

Substituindo a Eq.(2.46) na Eq.(2.44) ficamos com

$$J_{x'} = \frac{1}{\mu_x} \text{Re} \left(\Phi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\hbar k_{y'}}{\mu} |\Phi|^2. \quad (2.47)$$

Note que agora $J_{x'}$ depende também de $k_{y'}$ e do módulo ao quadrado da função de onda. Mas quando fazemos $\alpha = 0$ temos $1/\mu = 0$ e retornamos a uma forma similar ao caso isotrópico.

Quando o potencial unidimensional em questão for uma barreira quadrada, sabemos que a função $\Phi(x')$ é dada em cada região de potencial constante por

$$\Phi_j(x') = A_j e^{ik_j^+ x'} + B_j e^{ik_j^- x'}. \quad (2.48)$$

Substituindo a forma funcional de $\Phi_j(x')$ na Eq.(2.47) chegamos ao seguinte resultado:

$$J_{x_1} = \frac{\hbar}{\mu_x} \text{Re} \left[\left(A_1^* e^{-ik_1^+ x} + B_1^* e^{ik_1^- x} \right) \left(A_1 k_1^+ e^{ik_1^+ x} - B_1 k_1^- e^{-ik_1^- x} \right) \right] + \frac{\hbar k_y}{\mu} |\varphi|^2. \quad (2.49)$$

Lembrando das definições de k^\pm , β e γ dadas, respectivamente, pelas equações (2.24), (2.25) e (2.26), obtemos

$$J_{x_1} = \frac{\hbar \gamma}{\mu_x} (|A_1|^2 - |B_1|^2). \quad (2.50)$$

Para a terceira região devemos usar a mesma ideia, mas com a imposição de que $B_3 = 0$. Assim, temos que

$$J_{x_3} = \frac{\hbar}{\mu_x} \gamma |A_3|^2, \quad (2.51)$$

diferentemente da definição de corrente de probabilidade que ganha novos termos como mostrado nas Eqs.(2.44) e (2.32), no caso de potenciais puramente unidimensionais os coeficientes de reflexão e transmissão se mantêm com as mesmas definições dadas nas Eqs.(2.40) e (2.41).

2.3 Continuidade na derivada da função de onda

Na presente seção verificaremos se a introdução da anisotropia gera alguma influência na condição de continuidade da derivada da função de onda em pontos onde a energia potencial $V(x')$ é descontínua. Partiremos da suposição de que a própria função de onda admite continuidade, dada a sua interpretação probabilística, e utilizaremos o mesmo método aplicado no capítulo dois da referência (GRIFFITHS.D.J, 2003).

Seja $x' = 0$ um ponto de descontinuidade da energia potencial. Integrando a ES independente do tempo na variável x' no intervalo $(-\varepsilon, +\varepsilon)$, obtemos

$$\begin{aligned} E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \Psi(\mathbf{r}) dx' &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x'^2}(\mathbf{r}) dx' - \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y'^2}(\mathbf{r}) dx' \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{\mu} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x' \partial y'}(\mathbf{r}) dx' + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') dx'. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Veja que ao fazermos ε tender a zero, o lado esquerdo da equação vai a zero para qualquer função com valores finitos entre $(-\varepsilon, +\varepsilon)$. No primeiro termo do lado direito da equação devemos observar que o resultado da integral é a variação da derivada de primeira ordem da função de onda no intervalo $(-\varepsilon, +\varepsilon)$. Agora o segundo e o terceiro termos do lado direito da equação também tendem a zero, uma vez que a derivada parcial em relação a y' pode sair da integral. Dessa forma obtemos

$$\Delta \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x'} \right) = \frac{2\mu_x}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(x') \Psi(\mathbf{r}) dx'. \quad (2.53)$$

Portanto podemos observar que a da derivada da função de onda só admite descontinuidade para o caso de potenciais infinitos, como seria o caso de uma barreira de potencial do tipo delta de Dirac. Entretanto, aqui, estamos tratando com potenciais finitos, logo a integral da equação anterior deve ser igual a zero, de forma que podemos assumir a continuidade da derivada da função de onda.

2.4 Tunelamento

Agora nosso objetivo é investigar o comportamento da transmissão eletrônica através de uma barreira de potencial quadrada, para tanto podemos escrever as soluções da ES para as três regiões do potencial da Fig. 2.28 como

$$\begin{cases} \varphi_1(x') = A_1 e^{ik_1^+ x'} + B_1 e^{ik_1^- x'}, & \text{se } x' < 0, \\ \varphi_2(x') = A_2 e^{ik_2^+ x'} + B_2 e^{ik_2^- x'}, & \text{se } 0 < x' < a, \\ \varphi_3(x') = A_3 e^{ik_3^+ x'}, & \text{se } x' \geq a. \end{cases} \quad (2.54)$$

onde utilizamos a definição da Eq.(2.24) com $j = 1, 2$ e 3 .

Aplicando condição de continuidade para a função de onda e suas derivadas em $x = 0$, vamos obter

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad (2.55)$$

$$A_1 k_1^+ + B_1 k_1^- = A_2 k_2^+ + B_2 k_2^-. \quad (2.56)$$

Manipulando as Eqs.(2.56) e (2.55),obtemos

$$A_1 = A_2 \left(\frac{k_1^- - k_2^+}{k_1^- - k_1^+} \right) + B_2 \left(\frac{k_1^- - k_2^-}{k_1^- - k_1^+} \right). \quad (2.57)$$

Já as condições de continuidade em $x' = a$ fornecem

$$A_2 e^{ik_2^+ a} + B_2 e^{ik_2^- a} = A_3 e^{ik_1^+ a}, \quad (2.58)$$

$$A_2 k_2^+ e^{ik_2^+ a} + B_2 k_2^- e^{ik_2^- a} = A_3 k_1^+ e^{ik_1^+ a}. \quad (2.59)$$

Observe que podemos escrever a Eq.(2.59) como

$$A_2 \frac{k_2^+}{k_2^-} e^{ik_2^+ a} + B_2 e^{ik_2^- a} = A_3 \frac{k_1^+}{k_2^-} e^{ik_1^+ a}, \quad (2.60)$$

ou

$$A_2 e^{ik_2^+ a} + B_2 \frac{k_2^-}{k_2^+} e^{ik_2^- a} = A_3 \frac{k_1^+}{k_2^+} e^{ik_1^+ a}. \quad (2.61)$$

Subtraindo a Eq.(2.60) da (2.58), obtemos

$$A_2 = A_3 \left(\frac{k_2^- - k_1^+}{k_2^- - k_2^+} \right) e^{i(k_1^+ - k_2^+)a}. \quad (2.62)$$

Fazendo o mesmo para as Eqs.(2.61) e (2.58), conseguimos

$$B_2 = A_3 \left(\frac{k_2^+ - k_1^+}{k_2^+ - k_2^-} \right) e^{i(k_1^+ - k_2^-)a}. \quad (2.63)$$

Substituindo as Eqs.(2.63) e (2.62) na Eq.(2.57), temos

$$\frac{A_1}{A_3} = \left(\frac{k_2^- - k_1^+}{k_2^- - k_2^+} \right) \left(\frac{k_1^- - k_2^+}{k_1^- - k_1^+} \right) e^{i(k_1^+ - k_2^+)a} \quad (2.64)$$

$$+ \left(\frac{k_2^+ - k_1^+}{k_2^+ - k_2^-} \right) \left(\frac{k_1^- - k_2^-}{k_1^- - k_1^+} \right) e^{i(k_1^+ - k_2^-)a} \quad (2.65)$$

Mas, lembrando que $k_j^\mp = \beta \mp \gamma_j$ com

$$\beta = -\frac{\mu_x}{\mu} k_{y'}, \quad (2.66)$$

$$\gamma_j = \sqrt{\frac{2(E - V_j)\mu_x}{\hbar^2} + \left(\frac{\mu_x^2}{\mu^2} - \frac{\mu_x}{\mu_y} \right) k_{y'}^2}, \quad (2.67)$$

ficaremos com

$$\frac{A_1}{A_3} = \frac{e^{i\gamma_1 a}}{4\gamma_1 \gamma_2} [4\gamma_1 \gamma_2 \cos(\gamma_2 a) - [(\gamma_1^2 + \gamma_2^2)] 2i \sin(\gamma_2 a)]. \quad (2.68)$$

Dessa maneira, a forma geral para nosso coeficiente de transmissão é dado por

$$T = \left| \cos(\gamma_2 a) - \frac{i(\gamma_1^2 + \gamma_2^2)}{2\gamma_1 \gamma_2} \sin(\gamma_2 a) \right|^{-2}. \quad (2.69)$$

O que pode ser reescrito, após pequenas manipulações, como

$$T = \left[1 + \left(\frac{\gamma_1^2 - \gamma_2^2}{2\gamma_1 \gamma_2} \right)^2 \sin^2(\gamma_2 a) \right]^{-2}. \quad (2.70)$$

A equação acima nos fornece resultados importantes sobre a anisotropia do sistema, pois podemos observar que cada um de seus termos dependem do ângulo de inclinação da barreira de potencial mostrado na Fig.1, de forma que o próprio coeficiente de transmissão assume valores diferentes para cada ângulo considerado. Através disto, podemos afirmar que a anisotropia no hamiltoniano, devido aos diferentes valores de massas efetivas nas direções x e y , causa uma anisotropia na transmissão eletrônica.

Ainda é interessante ressaltar que estamos estudando o caso em que o elétron pode incidir na barreira de potencial com ângulos diferentes em relação ao eixo x' , chamaremos esse ângulo de ϕ . Se utilizarmos o resultado da velocidade de grupo das Eqs.(2.18) podemos definir as velocidades na direção x e y como

$$V_x = \hbar \left(\frac{k'_x}{\mu_x} + \frac{k'_y}{\mu} \right) \quad (2.71)$$

e

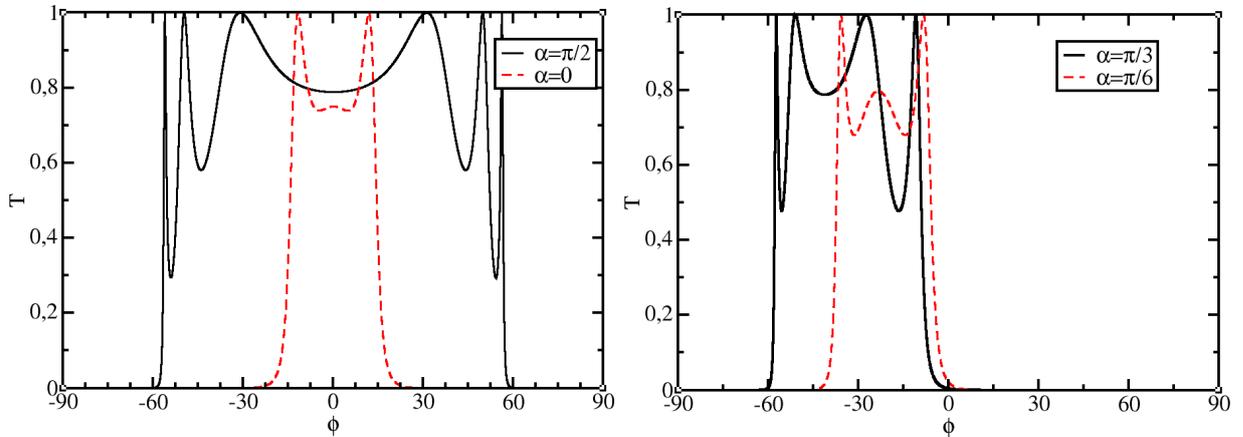
$$V_y = \hbar \left(\frac{k'_y}{\mu_y} + \frac{k'_x}{\mu} \right), \quad (2.72)$$

de forma que o ângulo de colisão ϕ fica definido por

$$\phi = \tan^{-1} \frac{V_y}{V_x}. \quad (2.73)$$

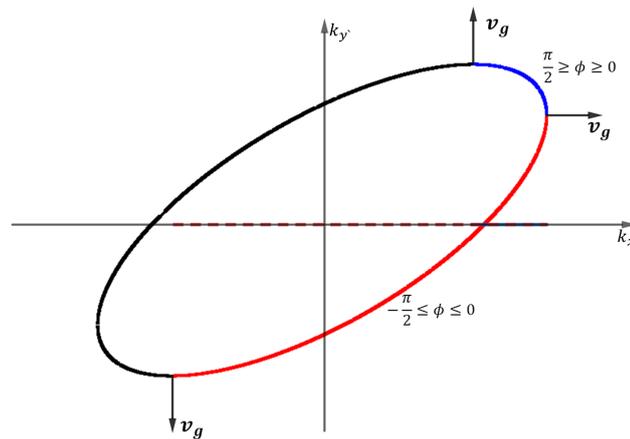
A Fig. 4 mostra o comportamento do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência de um elétron com energia 150 meV em uma barreira de potencial de largura 10 nm e altura $V_0 = 100$ meV. No painel (a) temos a curva preta (vermelha) para o caso $\alpha = 0$ ($\alpha = 90^\circ$), enquanto à direita consideramos uma orientação intermediária da barreira, especificamente $\alpha = 60^\circ$ (curva preta) e $\alpha = 30^\circ$ (curva vermelha). A partir desse gráfico já se torna possível observar a manifestação da anisotropia no coeficiente de transmissão. Para o caso em que o potencial está ao longo das direções x ou y obtemos um resultado semelhante ao

Figura 4 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ . À esquerda temos o gráfico para uma inclinação da barreira de potencial $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$, enquanto à direita podemos observar os casos de inclinação $\alpha = 60^\circ$ e $\alpha = 30^\circ$. Os parâmetros utilizados foram $a = 10$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV.



apresentado na referência(FANG.C, 2016), com uma perfeita simetria em relação a $\phi = 0$, com grande probabilidade de transmissão para um maior intervalo em ϕ ocorrendo quando a barreira encontra-se na direção y . Na Fig. 4(direita), observamos que a medida que giramos a orientação da barreira a transmissão perde sua simetria em relação a $\phi = 0$. Esse fato já era esperado e pode ser entendido a partir da ilustração apresentada na Fig. 5.

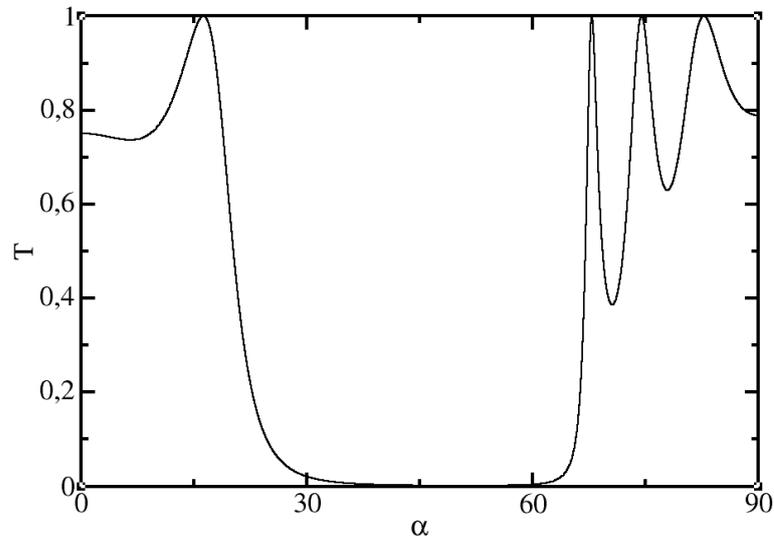
Figura 5 – Visualização da direção da velocidade de grupo e das regiões de ϕ positivo e negativo.



Note que, para qualquer valor de α entre 0° e 90° , a porção do espectro que contribui com valores positivos de ϕ é sempre menor que aquela correspondendo a valores negativos ϕ . É interessante observar também que o número de ângulos ϕ para os quais temos perfeita transmissão, acontecendo quando $\gamma_2 a$ é igual a valores inteiros de π , depende da inclinação da barreira.

Para que tenhamos uma melhor ideia do papel de α no transporte eletrônico, a Fig. 6 mostra o comportamento de T como função de α para o caso de incidência normal ($\phi = 0$), similar ao proposto na referência (L.ZHENGLU; TING, 2017). Observe que temos um *gap* de transmissão entre α igual 30° e 60° graus, com picos de transmissão perfeita para ângulos próximos a $16,2^\circ$, $67,8^\circ$, $74,4^\circ$ e $82,7^\circ$.

Figura 6 – Transmissão eletrônica em função do ângulo de inclinação α da barreira para incidência frontal $\phi = 0$. Os parâmetros utilizados foram $a = 10$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV.

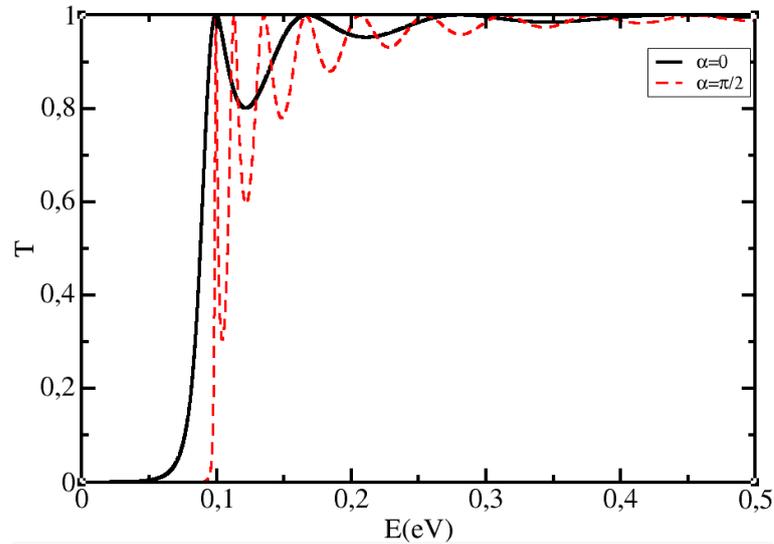


Na Fig. 7 avaliamos a probabilidade de transmissão em função da energia do elétron para incidência frontal nos casos em que $\alpha = 0$ (curva sólida preta) e $\alpha = 90^\circ$ (curva tracejada vermelha). Note que para ambos os casos $\gamma_2 = \sqrt{2(E - V)\mu_x/\hbar - \frac{m_x}{m_y}k_y^2}$, o que explica o comportamento oscilatório para valores de energia superior a $V = 100$ meV. Além disso, como μ_x é consideravelmente maior para $\alpha = 90^\circ$, temos uma frequência de oscilação bem mais acentuada nesse caso. Como mencionado anteriormente, temos transmissão perfeita quando $\gamma_2 a = n\pi$, com n inteiro. Dessa forma, os valores de energia para os quais $T = 1$ são dados por

$$E_n = V + \frac{\hbar^2}{2\mu_x} \left[\frac{n^2\pi}{a^2} + \frac{\mu_x}{\mu_y} k_y^2 \right], \quad (2.74)$$

o que justifica os picos ficarem cada vez mais espaçados. Vale ressaltar que à medida que E cresce, as amplitudes de oscilação diminuem e T tende a um, já que para grandes valores de energia caímos no limite clássico, onde um elétron com energia superior a energia potencial tem total probabilidade de ser transmitido.

Figura 7 – Transmissão eletrônica em função da energia do elétron para incidência frontal com $\alpha = 0$ (curva sólida preta), $\alpha = 90^\circ$ (curva tracejada vermelha) e $a = 10$ nm.



2.5 Condutância

Nesta seção iremos deduzir a equação de Landauer da condutância para o caso particular unidimensional e expandir para o caso que estamos estudando, o que nos permitirá avaliar a condutância numericamente a partir dos resultados do coeficiente de transmissão.

Se considerarmos elétrons se propagando através de uma barreira de potencial quadrada, podemos relacionar as correntes incidente I_{inc} e transmitida I_T por

$$I_T = I_{inc}T, \quad (2.75)$$

onde T é o coeficiente de transmissão. Mas a corrente pode ser escrita como

$$I = eJ = ev\rho, \quad (2.76)$$

onde e se trata da carga do elétron, v sua velocidade e ρ a densidade eletrônica. No qual podemos ver a corrente de incidência como

$$I_T = ev_{inc}. \quad (2.77)$$

A referência (G.BROCKS, 2015) mostra de uma forma bastante didática que podemos relacionar o produto $v_{inc}\rho$ com a diferença de voltagem U aplicada entre as extremidades da região onde se dá o transporte de cargas da seguinte forma

$$v_{inc}\rho = \frac{eU}{\hbar\pi}. \quad (2.78)$$

Portanto, podemos aplicar este resultado na Eq.(2.77) e obter

$$I_T = \frac{e^2 U}{\hbar \pi} T. \quad (2.79)$$

Definindo a condutância como sendo a razão entre a corrente transmitida pela voltagem, temos

$$G = G_0 T, \quad (2.80)$$

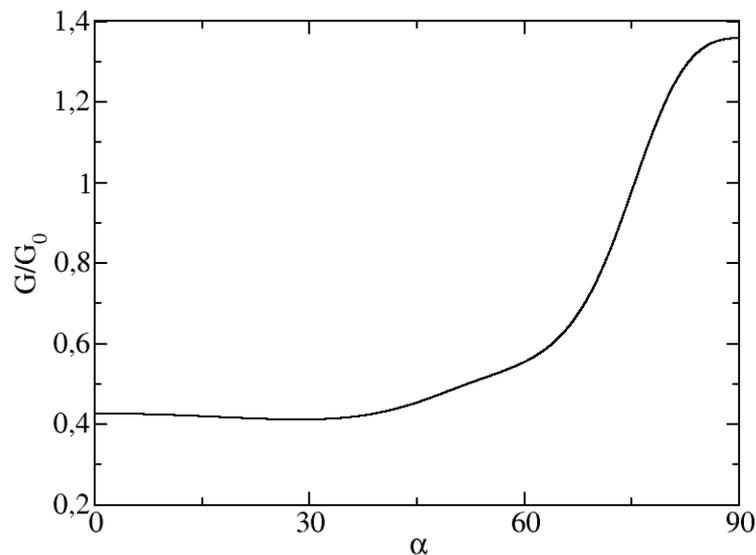
onde $G_0 = e^2/\hbar\pi$ é chamado de quantum de condutância.

Devemos observar que este resultado é insuficiente para determinarmos a condutância no caso bidimensional do qual estamos tratando neste trabalho, mas é possível relacioná-lo ao nosso caso. Primeiramente devemos observar que o potencial apresentado na ES bidimensional é uma barreira quadrada orientada na direção de x' , dessa forma a única contribuição da corrente deve ser aquela na direção x' , de forma que definimos (ZHANG*.X, 2007)(BARBIER, 1931)

$$G = G_0 \int T(\alpha) \cos(\phi) d\phi. \quad (2.81)$$

A integral surge uma vez que, para um dado valor de energia do elétron incidente, precisamos computar a contribuição da transmissão eletrônica para cada ângulo de incidência ϕ .

Figura 8 – Condutância em função de α através de uma barreira de largura 10 nm e altura de 100 meV.



Agora podemos calcular numericamente o valor da condutância em função da orientação α da barreira de potencial quadrada. Esse resultado está mostrado na Fig. 8 acima para uma barreira de largura 10 nm e altura de 100 meV. Note que G decresce levemente a medida que aumentamos α , atingindo seu mínimo na vizinhança de $\alpha = 30^\circ$. A partir dessa orientação a

condutância cresce sofrendo uma leve oscilação e chegando ao seu valor máximo para o caso em que a barreira está orientada na direção y . Desse resultado vemos que a condutância ao longo do eixo y' é aproximadamente 3 vezes maior na direção y quando comparada à direção x' .

3 TRANSPORTE ELETRÔNICO EM REDE DE BARREIRAS DE POTENCIAL

No presente capítulo iremos introduzir uma super-rede gerada por uma sequência de barreiras de potenciais quadradas e calcularemos o seu espectro de energia. Posteriormente desenvolveremos o método da matriz de transferência com o intuito de calcular a transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras.

3.1 Estrutura de bandas de uma super-rede unidimensional

Agora iremos estudar as estruturas de bandas geradas por uma série de barreiras de potencial quadradas unidimensional e investigar qual a influência da orientação dessa super-rede sobre a largura das barreiras. Para isso, devemos nos lembrar do teorema de Bloch (TB), o qual afirma que dado um potencial com periodicidade de \mathbf{R}

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (3.1)$$

podemos determinar que os autoestados Ψ do hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

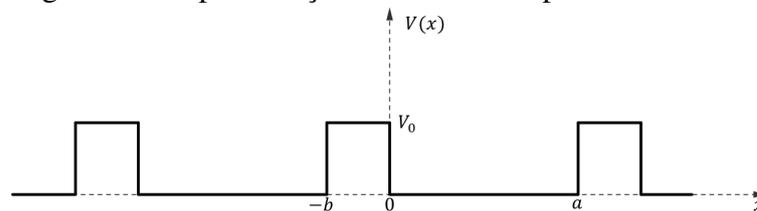
tem a seguinte forma

$$\Psi(r) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}v(r), \quad (3.3)$$

onde v é uma função periódica, com a mesma periodicidade do potencial.

Para o caso de um potencial unidimensional ilustrado na Fig.9

Figura 9 – Representação da barreira de potencial.



Para encontrarmos o valor da função v iremos substituir a Eq.(3.3) na (2.22), onde primeiramente assumiremos que $-b \leq x \leq 0$ e obteremos

$$\frac{d^2v}{dx^2} + 2i\delta\frac{dv}{dx} - (\delta^2 + \rho_1^2)v = 0, \quad (3.4)$$

definindo

$$\delta^2 = \kappa + \frac{\mu_x}{\mu} k_y^2, \quad (3.5)$$

$$\rho_1^2 = \left(\frac{\mu_x}{\mu_y} - \frac{\mu_x^2}{\mu^2} \right) k_y^2 + \frac{2(E - V_0)}{\hbar^2}, \quad (3.6)$$

com a solução dada por

$$v(x) = Ae^{(-i\delta + \rho_1)x} + Be^{(-i\delta - \rho_1)x}. \quad (3.7)$$

Para a região $0 \leq x \leq a$

$$\frac{d^2v}{dx^2} + 2i\delta \frac{dv}{dx} - (\delta^2 - \rho_2^2)v = 0, \quad (3.8)$$

onde

$$\rho_2^2 = \left(\frac{\mu_x}{\mu_y} - \frac{\mu_x^2}{\mu^2} \right) k_y^2 + \frac{2E}{\hbar^2}, \quad (3.9)$$

em que a solução deve ser dada por

$$v(x) = Ce^{-i(\delta + \rho_2)x} + De^{-i(\delta - \rho_2)x}. \quad (3.10)$$

As constantes A, B, C e D devem ser escolhidas de forma que a solução nas duas regiões tenham o mesmo valor e a primeira derivada seja contínua em $x = 0$, tal que

$$A + B = C + D, \quad (3.11)$$

$$(-i\delta + \rho_1)A + (-i\delta - \rho_1)B = -i(\delta + \rho_2)C + -i(\delta - \rho_2)D. \quad (3.12)$$

Devemos notar que v possui periodicidade $a + b$, de forma que $v(-b) = v(a)$,

$$Ae^{-(-i\delta + \rho_1)b} + Be^{-(-i\delta - \rho_1)b} = Ce^{-i(\delta + \rho_2)a} + De^{-i(\delta - \rho_2)a}, \quad (3.13)$$

$$(-i\delta + \rho_1)Ae^{-(-i\delta + \rho_1)b} + (-i\delta - \rho_1)Be^{-(-i\delta - \rho_1)b} = (\delta + \rho_2)Ce^{-i(\delta + \rho_2)a} + (\delta - \rho_2)De^{-i(\delta - \rho_2)a} \quad (3.14)$$

As equações acima só podem ser satisfeitas se ρ_1 e ρ_2 satisfazerem a relação

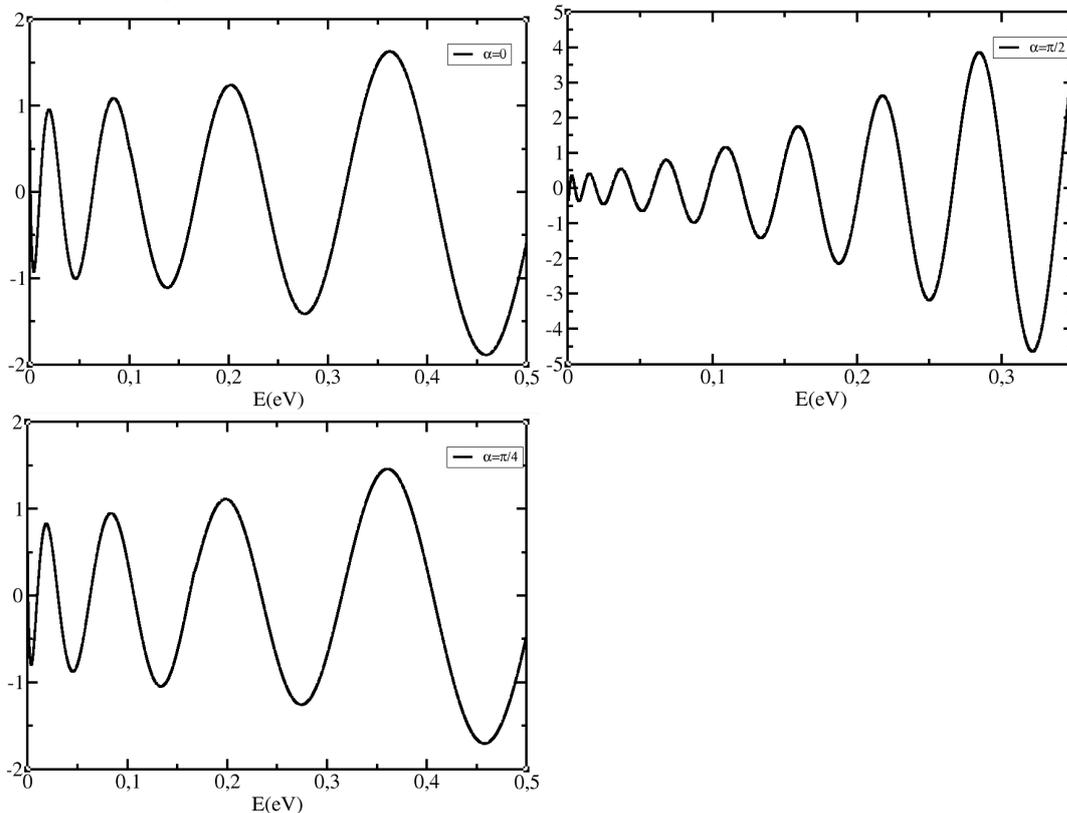
$$\frac{\rho_1 - \rho_2}{2\rho_2\rho_1} \sinh \rho_1 b \sin \rho_2 a + \cosh \rho_1 b \cos \rho_2 a = \cos \delta(a + b). \quad (3.15)$$

Observe que este resultado trata-se de uma equação transcendental semelhante a encontrada na referência (KRONIG, 1931), diferindo pelas constantes que definimos, onde sua resolução só pode ser efetuada por meios numéricos. Entretanto ainda podemos analisá-la e retirar algumas informações físicas razoáveis através de sua forma funcional.

Veja que o lado esquerdo da equação está em função de ρ_2 e ρ_1 , conseqüentemente a função depende da energia, ângulo de inclinação α e de incidência ϕ . Dessa forma, torna-se possível afirmar que a forma do espectro de energia deve variar com a orientação do sistema de eixos e, conseqüentemente, os *gaps* podem se tornar maiores ou menores, dependendo dessa orientação e da direção com a qual a partícula foi lançada.

Agora se dissermos que o lado esquerdo da Eq.(3.15) é representado pela função $f(E) = \cos \delta(a + b)$, onde todos os outros termos são constantes e a única variável independente é a energia E poderemos construir os gráficos mostrados abaixo.

Figura 10 – Representação geométrica da função $f(E)$, onde o ângulo $\phi = 0$ e a energia varia para inclinações da barreira: $\alpha = 0$, $\alpha = \pi/2$ e $\alpha = \pi/3$ respectivamente. Os parâmetros utilizados foram $V_0 = 100$ meV, $a = 10$ nm e $b = 5$ nm.



Note que a função $f(E)$ deve ser limitada em um intervalo de $[-1, 1]$, pois o lado direito da Eq.(3.15) é uma função cosseno.

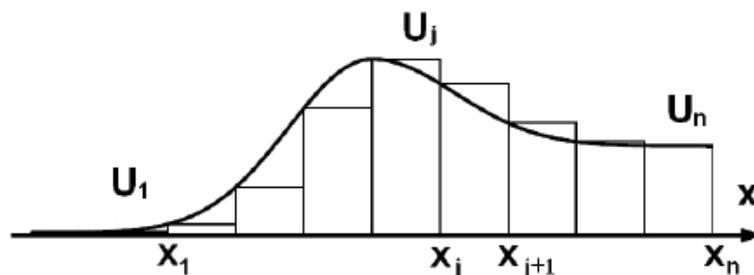
Através da Fig.10 apresentada, torna-se possível ver que existem intervalos de energias que estão fora dos valores aceitáveis, portanto existem estados que não são permitidos pelo sistema e outros estados que são. Estas condições, determinadas pela energia da partícula, dependem da orientação que escolhermos para nosso eixo coordenado, mostrando que nosso problema apresenta uma anisotropia angular no espectro de energia, como já era esperado.

É interessante observar que, independente do ângulo escolhido, os *gaps* apresentam intervalos cada vez menores quando aumentamos a energia e é ainda menor quando a inclinação está voltada para o ângulo $\alpha = \pi/2$, sendo a mesma direção que verificamos ter maior coeficiente de transmissão eletrônica em um intervalo ϕ .

3.2 Método da matriz de transferência

Na presente seção iremos estudar o método da matriz de transferência(MT) que consiste em aproximar um potencial contínuo suave por uma sequência de barreiras quadradas, de forma que a aproximação será tão melhor quanto mais estreitas forem as barreiras(SENA, 2018)(SARKAR, 2017), onde a Fig11 ilustra exatamente o que foi falado anteriormente.

Figura 11 – Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma sequência de barreiras(SENA, 2018).



Observe que a região delimitada por x_j e x_{j-1} possui o potencial constante e igual a $U_j = V(x_j)$. Na nomenclatura do capítulo anterior, isso deveria ser escrito como:

$$\varphi_j(x) = A_j e^{ik_{x_j}^+ x} + B_j e^{ik_{x_j}^- x} = e^{i\beta_j x} (A_j e^{i\gamma_j x} + B_j e^{-i\gamma_j x}). \quad (3.16)$$

Perceba que o método MT consiste basicamente em transferir os parâmetros da função de onda da região de potencial U_{j-1} para U_{j+1} , ou seja, buscamos associar os coeficientes de reflexão e transmissão de antes com os de depois da barreira de potencial.

Dessa forma devemos derivar a função de onda para obter

$$\frac{d\varphi_j}{dx} = i(\beta_j + \gamma_j)e^{ik_j^+x} + (\beta_j - \gamma_j)e^{-ik_j^-x}, \quad (3.17)$$

Perceba que podemos agrupar as Eqs.(3.16) e (3.17) e obter a seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} \varphi_j(x) \\ \frac{d\varphi_j}{dx}(x) \end{pmatrix} = G_j(x)M_j(x) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

onde

$$G_j(x) = \begin{pmatrix} e^{i\beta x} & e^{i\beta x} \\ ie^{i\beta x}(\beta + \gamma_j) & ie^{i\beta x}(\beta + \gamma_j) \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

$$M_j(x) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_j x} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma_j x} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Se estabelecermos agora a condição de continuidade de ϕ e ϕ' em $x = x_{j-1}$, devemos obter

$$\begin{pmatrix} \varphi_j(x_{j-1}) \\ \frac{d\varphi_j}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{j-1}(x_{j-1}) \\ \frac{d\varphi_{j-1}}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

em que

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = N_j \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

$$N_j = M_j^{-1}(x_{j-1})G_j^{-1}(x_{j-1})G_{j-1}(x_{j-1})M_{j-1}(x_{j-1}) \quad (3.23)$$

de forma que podemos obter a seguinte relação

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

$$N = N_j N_{j-1} \dots N_2. \quad (3.25)$$

Assim podemos afirmar que dado uma rede de barreiras de potencial iremos ser capazes de associar os coeficientes da função de onda antes da primeira barreira com o da n -ésima.

Desenvolvendo ainda cada termos da MT iremos obter as seguintes relações

$$G_j^{-1}(x_{j-1}) = \frac{ie^{-i\beta_j x_{j-1}}}{2\gamma_j} \begin{pmatrix} (\beta_j - \gamma_j) & -i \\ (\beta_j + \gamma_j) & i \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

$$M_j^{-1}(x_{j-1}) = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma_j x_{j-1}} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma_j x_{j-1}} \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

e finalmente, tomando $\beta_j = \beta_{j-1}$, temos que

$$N_j = \frac{1}{2\gamma_j} \begin{pmatrix} (\gamma_j + \gamma_{j-1})e^{-i(\gamma_j - \gamma_{j-1})x_{j-1}} & (\gamma_j - \gamma_{j-1})e^{-i(\gamma_j + \gamma_{j-1})x_{j-1}} \\ (\gamma_j - \gamma_{j-1})e^{i(\gamma_j + \gamma_{j-1})x_{j-1}} & (\gamma_j + \gamma_{j-1})e^{i(\gamma_j - \gamma_{j-1})x_{j-1}} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Em geral, podemos ver que esse método é capaz de reduzir o problema à solução de uma única equação matricial, mas em compensação devemos trabalhar com um produtório de matriz que, em muitos casos, só pode ser calculado numericamente.

Lembre-se que o coeficiente de transmissão é dado por

$$T = \left| \frac{A_n}{A_1} \right|^2, \quad (3.29)$$

Na Fig.12 iremos estabelecer a condição de que a largura da barreira seja igual à distância entre elas, dessa forma podemos assumir o seguinte padrão $x_1 = 0$, $x_2 = a$, $x_3 = 2a$ e assim sucessivamente, onde a é a largura das barreiras. Portanto, a ideia é utilizar a definição de MT que nos permite relacionar os parâmetros da função de onda na primeira região com a quinta região do potencial e determinar os termos da MT para aplicar na Eq.(3.33).

Observe que podemos utilizar a Eq.(3.34) em que

$$\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

$$M = N_5 N_4 N_3 N_2. \quad (3.35)$$

Dessa forma podemos definir

$$O = N_5 N_4, \quad (3.36)$$

onde

$$N_5 = \frac{1}{2\gamma_1} \begin{pmatrix} (\gamma_1 + \gamma_2)e^{-3i(\gamma_1 - \gamma_2)a} & (\gamma_1 - \gamma_2)e^{-3i(\gamma_1 + \gamma_2)a} \\ (\gamma_1 - \gamma_2)e^{3i(\gamma_1 + \gamma_2)a} & (\gamma_1 + \gamma_2)e^{3i(\gamma_1 - \gamma_2)a} \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

$$N_4 = \frac{1}{2\gamma_2} \begin{pmatrix} (\gamma_2 + \gamma_1)e^{-2i(\gamma_2 - \gamma_1)a} & (\gamma_2 - \gamma_1)e^{-2i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \\ (\gamma_2 - \gamma_1)e^{2i(\gamma_2 + \gamma_1)a} & (\gamma_2 + \gamma_1)e^{2i(\gamma_2 - \gamma_1)a} \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

em que

$$O_{11} = \frac{1}{\gamma_1 \gamma_2} \left[(\gamma_1 + \gamma_2)^2 e^{i(\gamma_2 - \gamma_1)a} - (\gamma_1 - \gamma_2)^2 e^{-i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right], \quad (3.39)$$

$$O_{12} = \frac{1e^{-5i\beta a}}{\gamma_1 \gamma_2} \left[(\gamma_2^2 - \gamma_1^2) e^{i(\gamma_2 - 5\gamma_1)a} - (\gamma_2^2 - \gamma_1^2) e^{-i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right], \quad (3.40)$$

$$O_{21} = \frac{1}{\gamma_1 \gamma_2} \left[(\gamma_1^2 - \gamma_2^2) e^{i(\gamma_2 + 5\gamma_1)a} + (\gamma_2^2 - \gamma_1^2) e^{-5i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right], \quad (3.41)$$

$$O_{22} = \frac{1}{\gamma_1 \gamma_2} \left[(\gamma_1 - \gamma_2)^2 e^{5i(\gamma_2 + \gamma_1)a} - (\gamma_2 - \gamma_1)^2 e^{i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right]. \quad (3.42)$$

Note que o termo que necessitamos é dado por M_{22} que pode ser determinado através da relação

$$\begin{aligned} M_{22} &= G_{21}N_{12} + G_{22}N_{22} \\ &= \frac{1}{\gamma_1^2 \gamma_2^2} \left\{ \left[(\gamma_1^2 - \gamma_2^2) e^{i(\gamma_2 + 5\gamma_1)a} + (\gamma_2^2 - \gamma_1^2) e^{-5i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right] \right. \\ &\quad \left[(\gamma_1 + \gamma_2)^2 e^{i(\gamma_2 - \gamma_1)a} - (\gamma_1 - \gamma_2)^2 e^{-i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right] + \\ &\quad \left[(\gamma_1 - \gamma_2)^2 e^{5i(\gamma_2 + \gamma_1)a} - (\gamma_2 - \gamma_1)^2 e^{i(\gamma_2 + \gamma_1)a} \right] \\ &\quad \left. \left[(\gamma_1^2 - \gamma_2^2) e^{i(\gamma_2 + \gamma_1)a} + (\gamma_2^2 - \gamma_1^2) e^{-i(\gamma_2 - \gamma_1)a} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde N_{12} e N_{22} são os elementos da matriz $N_3 \times N_2$, sendo

$$\kappa_1 = (\gamma_1^2 - \gamma_2^2), \quad (3.44)$$

$$\kappa_2 = (\gamma_1 + \gamma_2)^2, \quad (3.45)$$

$$\kappa_3 = (\gamma_1 - \gamma_2)^2, \quad (3.46)$$

de forma que

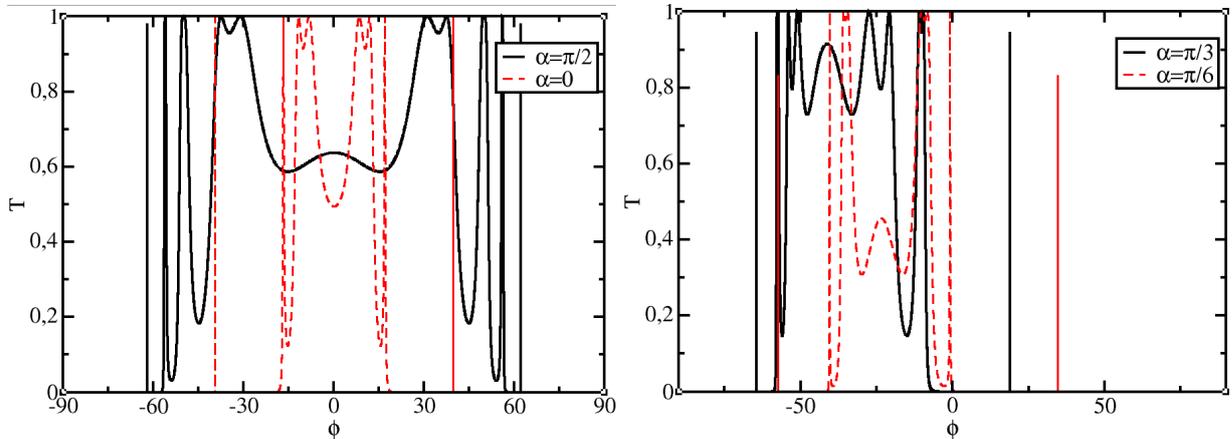
$$\begin{aligned} M_{22} &= \frac{\kappa_1}{\gamma_1^2 \gamma_2^2} \left\{ \left(e^{2i(\gamma_2 - 2\gamma_1)a} + e^{2i(3\gamma_2 - 2\gamma_1)a} + e^{6i(\gamma_2 + \gamma_1)a} + e^{2i(2\gamma_2 - 3\gamma_1)a} \right) \kappa_2 \right. \\ &\quad \left. + \left(e^{2i\gamma_1 a} - e^{2i(\gamma_2 + \gamma_1)a} - e^{-4i(\gamma_2 + \gamma_1)a} + e^{4i\gamma_1 a} \right) \kappa_3 \right\}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

Portanto, se utilizarmos a Eq.(3.33), iremos obter o coeficiente de transmissão para o caso de duplas barreiras dado por

$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2}. \quad (3.48)$$

De forma que podemos representar geometricamente através da Figs.13, onde ao compararmos com a Fig.4 iremos conseguir concluir que a simetria na transmissão eletrônica ainda se mantém e o gráfico ainda sofre uma translação caso o ângulo de inclinação α esteja entre 0^0 e 90^0 . Entretanto, podemos notar que o número de pontos onde ocorre uma transmissão total teve uma mudança, onde a transmissão torna-se mais focada em algumas regiões.

Figura 13 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ para dupla barreira de potencial. À esquerda temos o gráfico para uma inclinação da barreira de potencial $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi/2$. Na direita podemos observar os casos de inclinação $\alpha = \pi/3$ e $\alpha = \pi/6$. Os parâmetros utilizados foram $a = 20nm$, $E = 150meV$ e $V_0 = 100meV$



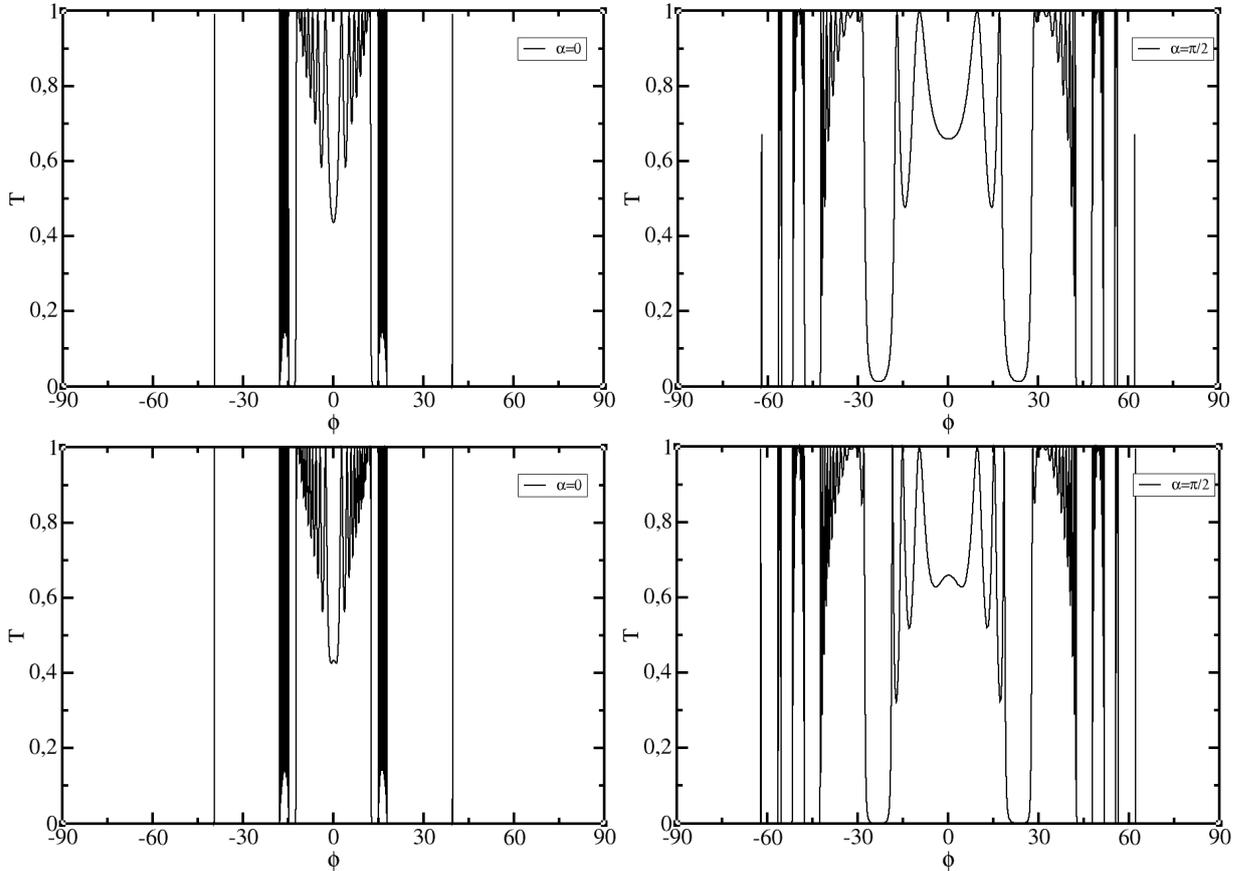
3.2.2 Transporte eletrônico para múltiplas barreiras de potencial

Anteriormente calculamos a transmissão para uma e duas barreiras de potencial e verificamos que a anisotropia estava presente em cada um destes casos. Nosso objetivo agora é estudar essa anisotropia no transporte eletrônico em uma sequência de barreiras como esta representada na Fig.9.

Para estudarmos essa anisotropia devemos nos lembrar que a transmissão eletrônica é dada pela Eq.(3.33), onde o número de regiões determina o produto que devemos calcular, então se colocarmos o caso de 10 ou 15 barreiras, o cálculo se torna muito complexo, por este motivo iremos apresentar os resultados numericamente e discutí-los.

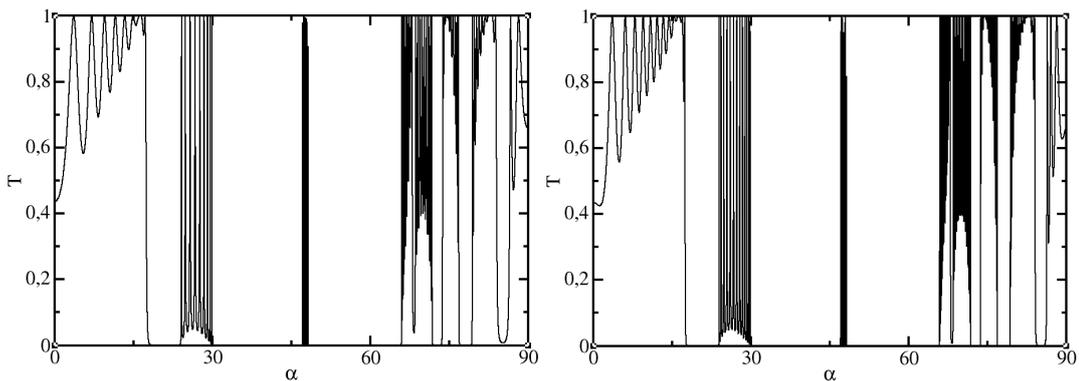
Se compararmos a Fig. 14 com as Figs.4 e 13 iremos ver que existe um aumento no número de valores para ϕ em que ocorre transmissão total, onde este crescimento vai se tornando um intervalo de transmissões totais cada vez mais contínuo, semelhante ao que ocorre em uma banda de energia para estados permitidos de uma partícula, entretanto este caso se refere a uma banda de transmissão permitida, onde uma partícula lançada nesse intervalo sofrerá tunelamento e passará pela barreira. Assim como estamos representando no gráfico da transmissão eletrônica em função do ângulo ϕ de incidência para uma inclinação α fixa abaixo.

Figura 14 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de colisão ϕ e inclinação $\alpha = \pi/2$. Na parte de cima temos o gráfico com 10 barreiras de potencial quadrado e embaixo podemos observar o caso de 15 barreiras. Os parâmetros utilizados foram $a = 20$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV.



Agora utilizaremos a mesma ideia da Fig.6 e verificaremos a transmissão para o caso frontal com as mesmas quantidades de barreiras anteriores, para que possamos ter uma ideia melhor da orientação que gera uma transmissão mais eficiente, onde

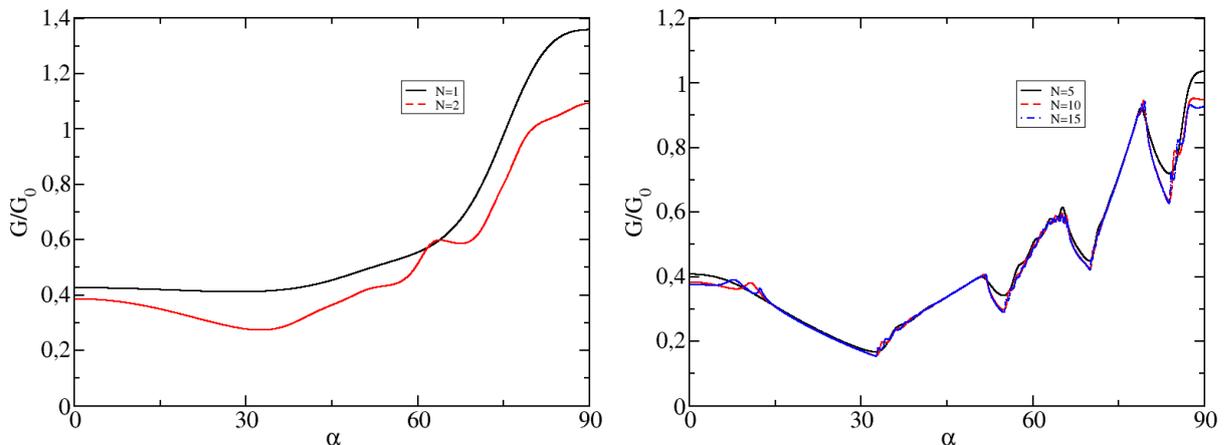
Figura 15 – As figuras apresentam o coeficiente de transmissão em função do ângulo de inclinação α da barreira para colisões frontais de ângulo $\phi = 0$. À esquerda temos o gráfico com 10 barreiras de potencial quadrado e na direita podemos observar o caso de 15 barreiras. Os parâmetros utilizados foram $a = 20$ nm, $E = 150$ meV e $V_0 = 100$ meV



Note que temos as mesmas condições da Fig.13, mas neste caso estamos considerando α variando para $\phi = 0$ gerando colisões sempre frontais na barreira de potencial. Portanto, podemos perceber que ocorre novamente intervalos cada vez mais contínuos de transmissões totais, ou seja, também observamos bandas de transmissão para o caso frontal. As transmissões se tornam maiores nos intervalos mais próximos de $\pi/2$, como também podemos ver isso ocorrendo nas Figs.4 e 13, isso nos dar a ideia de que a direção *zigzag* é a mais propícia a gerar maior transmissão eletrônica. Vale ressaltar que não existe uma diferença qualitativa acentuada entre os casos de 10 e 15 barreiras.

Outro resultado interessante é quando verificamos o gráfico para a condutância ao colocarmos múltiplas barreiras de potencial.

Figura 16 – As figuras apresentam o gráfico da condutância em função do ângulo de inclinação α . Na esquerda temos a representação para 1 e 2 barreiras de potencial e para 5,10 e 15 barreiras na direita. Os parâmetros utilizados foram $a = 10$ nm, $b = 5$ nm e $V_0 = 100$ meV .



Note que a Fig.16 apresenta a condutância obtida semelhante a seção do capítulo anterior, entretanto consideramos um maior número de barreiras, onde podemos ver que isso influencia em um aumento de picos de condução, gerando uma oscilação em seus valores. É interessante observar que o ângulo que apresenta uma maior condutância é $\pi/2$ quando consideramos 1 a 5 barreiras, mas ao aumentarmos para 10 ou 15, o local com o maior valor de condutância sofre uma mudança. Em geral podemos afirmar que a direção que possui uma maior probabilidade de conduzir um elétron é nas proximidades de $\pi/2$.

4 CONCLUSÕES

No presente trabalho foi possível estudar o espectro eletrônico de materiais bidimensionais anisotrópicos sujeitos a uma super-rede criada por barreiras quadradas de potencial, bem como investigar seus efeitos na transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras. Inicialmente utilizamos o método da massa efetiva para definir o Hamiltoniano de um elétron no espaço 2D anisotrópico. Em seguida, resolvemos a ES do elétron sujeito a um potencial unidimensional arbitrariamente orientado e verificamos que o portador de carga apresenta uma direção de propagação, dada pela velocidade de grupo, diferente do vetor de onda. Isso ocorre basicamente pela introdução de uma massa efetiva dependente da direção do espaço, levando-nos à curvas de energia dadas por elipses e não por círculos, como no caso convencional. A consequência deste comportamento é refletida diretamente na definição da corrente de probabilidade, que tem sua definição modificada para que a conservação da probabilidade seja mantida. Além disso, pudemos demonstrar que a nova forma da corrente de probabilidade não altera a definição do coeficiente de transmissão que encontramos comumente nos livros acadêmicos para o caso de potenciais unidimensionais.

Entretanto ao usarmos o hamiltoniano anisotrópicos com um potencial quadrado 2D, torna-se possível observar que sua anisotropia direcional reflete diretamente no transporte eletrônico. Dessa forma determinamos a transmissão em função de ϕ para os ângulos de inclinação das barreiras como 0^0 , $\pi/2$, $\pi/3$, $\pi/6$. Concluimos que para inclinações de barreira mais próximas de $\pi/2$, existe um intervalo maior dos ângulos ϕ que geram transmissões eletrônicas e em alguns valores, desse intervalo, a transmissão é total.

Posteriormente, consideramos uma super-rede de potencial quadrado e aplicamos o teorema de Bloch para calcular o espectro eletrônico com o hamiltoniano anisotrópico e descobrimos que a forma do espectro depende da orientação do sistema coordenado, gerando zonas de energias permitidas que variam de acordo com os ângulos escolhidos.

Finalmente, aplicamos o método da matriz de transferência para investigar a transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras, sendo possível observar que ao aumentarmos o número de barreiras criamos bandas de transmissão.

REFERÊNCIAS

- ANKIT, D. Applications of graphene for communication, electronics and medical fields. **ICE-EOT**, n. 7755131, p. 1–6, 2016.
- ANTONIO, C.; VITTORIO, P. Exfoliation of few-layer black phosphorus in low-boiling-point solvents and its application in li-ion batteries. **American Chemical Society**, n. 16163, p. 1–30, 2017.
- BARBIER, M. Kronig-penney model on bilayer graphene: Spectrum and transmission periodic in the strength of the barriers. **Physical Review B**, p. 1–10, 1931.
- C.II-TONG. On the motion of a particle with anisotropic mass. **International Journal of Theoretical Physics**, n. B-4000, p. 1–10, 1973.
- CUNHA, S. M. **Propriedades Eletrônicas de Fios Quântica de Semicondutores Anisotrópicos e Dinâmica de Pacotes de Onda Em Monocamada de Fosforo Negro**. digital — UFC, 2017.
- EZAWA, M. Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons. **Phys. Rev. B**, n. 045432, p. 1–73, 2006.
- FANG.C. Anisotropic ballistic transport through a potential barrier on monolayer phosphorene. **Chinese Physics Letters**, n. 057301-1, p. 1–4, 2016.
- G.BROCKS. Electron transport at the nanoscale lecture notes, preliminary version. **Tech. Rep.**, 2015.
- G.D.CHEN. Effects of electron mass anisotropy on hall factors in 6h-sic. **american institute of physics**, n. S0003-6951(96)00610-X, p. 1–3, 1995.
- GONG, P. Isotropic and anisotropic physical properties of quasicrystals. **THE EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B**, n. 119991, p. 477–481, 2006.
- GRIFFITHS.D.J. **Mecânica quântica**. [S.l.: s.n.], 2003.
- G.RUDIGER. Anisotropic phonon properties and effective electron mass in -ga₂o₃. **american institute of physics**, n. Lett. 114, 142102, p. 1–10, 2019.
- K.MIYUKIM; P.BENNETT. Anisotropic surface energy. **International Academic Symposium**, n. V.3, p. 105–117, 2009.
- KRONIG, R. de L. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. **Proc. R. Soc. Lond. A**, p. 1–7, 1931.
- LIMA, W. P. **Modelo Tight-Binding Aplicado ao Cálculo da Estrutura de Bandas dos Materiais Bidimensionais Grafeno e Fosforeno**. digital — Unilab, 2018.
- L.ZHENGLU; TING, C. Generation of anisotropic massless dirac fermions and asymmetric klein tunneling in few-layer black phosphorus superlattices. **NanoLetters**, n. 94720, p. 1–7, 2017.
- MARRION, J. B.; THORNTON, S. T. **Classical Dynamics of Particles and Systems**. 5^a. ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2003.

- MENESES, R. D. S. **Estudo de Índícios de Anisotropia no Universo: Supernovas, Quasares e Galáxias**. digital — Universidade Federal da Bahia, 2015.
- MORRISON, C.; MYRONOV, M. Electronic transport anisotropy of 2d carriers in biaxial compressive strained germanium. **AIP Publishing**, n. 111 192103, p. 1–17, 2017.
- MOSCHETTI, G. Anisotropic transport properties in inas/alsb heterostructures. **Applied Physics Letters**, n. doi:10.1063/1.3527971, p. 3–5, 2010.
- NOVOSELOVE, K. S. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. **Nature Materials**, n. 438, p. 197–200, 2005.
- RITTER, K.; LYDING, J. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons. **Nature Materials**, n. 8, p. 235–242, 2008.
- R.RASHIDI. Gold nanoparticles: Synthesis and applications in drug delivery. **Tropical Journal of Pharmaceutical Research**, n. 1596-5996, p. 5–9, 2014.
- SARKAR, S. D. Anisotropic transport of normal metal-barrier-normal metal junctions in monolayer phosphorene. **J. Phys.: Condens. Matter**, p. 1–13, 2017.
- SENA, S. H. R. de. **Transporte e Estados Confinados de Portadores de Carga em Nanoestruturas de Grafeno**. digital — UFC, 2018.
- SHUXING, W.; KWAN, H. 2d black phosphorus: from preparation to applications for electrochemical energy storage. **Advanced Science**, n. 1700491, p. 16–23, 2018.
- YUN, W.; S.PO-HSUN. Magnetic anisotropic energy gap and strain effect in au nanoparticles. **Nanoscale Research Letters**, n. 111909, p. 1–7, 2009.
- ZHANG*.X. Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice. **Physical Review B**, p. 1–7, 2007.
- ZHI, G.; AMIT, V. Anisotropic thermal conductivity in single crystal b-gallium oxide. **Physical Science Publishing**, n. 111909, p. 1–5, 2015.