



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

MARIA EMILE DE SOUZA SILVA

ESTUDO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO NA REDE $\alpha - T_3$

REDENÇÃO - CE

2025

MARIA EMILE DE SOUZA SILVA

ESTUDO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO NA REDE $\alpha - T_3$

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Licenciado em Física. Área de concentração: Física.

Orientador(a): Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena

MARIA EMILE DE SOUZA SILVA

ESTUDO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO NA REDE $\alpha - T_3$

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Licenciado em Física.
Área de concentração: Física.

Trabalho aprovado. Redenção, Ceará, 2025:

BANCA EXAMINADORA



Documento assinado digitalmente
SILVIA HELENA ROBERTO DE SENA
Data: 10/06/2025 18:23:34-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena (Orientadora)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Documento assinado digitalmente
ARISTEU ROSENDO PONTES LIMA
Data: 10/06/2025 20:52:43-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Documento assinado digitalmente
DIEGO RABELO DA COSTA
Data: 10/06/2025 19:44:20-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

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

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

Silva, Maria Emile de Souza.

S586e

Estudo do coeficiente de transmissão na rede α -T₃ /
Maria Emile de Souza Silva. - Redenção, 2025.
46f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto De Ciências Exatas E Da
Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira, Redenção, 2025.

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

1. Rede α -T₃. 2. Dispersão cônica. 3. Transmissão
eletrônica. 4. Tunelamento super Klein. I. Título

CE/UF/BSCA

CDD 000

Às raízes do meu pensamento: à minha mãe, Marilene, que plantou em mim o amor pelas palavras, e ao meu pai, Cláudio, que desenhcou com números meu primeiro universo. Com eles, comecei a ler o mundo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, cuja presença silenciosa foi essencial para essa jornada barulhenta.

À minha família, pelo apoio financeiro e pelo constante incentivo à construção da minha trajetória acadêmica. Em especial, agradeço ao meu pai, Cláudio José, que, com as mãos calejadas pelo trabalho árduo, sempre se esforçou para me proporcionar uma vida confortável e a oportunidade de estudar. Agradeço também à minha mãe, Marilene Martins, por cultivar em mim, desde o jardim de infância, o valor do conhecimento e da educação.

Aos amigos que a faculdade me deu, Wesley Paulino e Luíz Davi, minha sincera gratidão. Vocês tornaram o ambiente acadêmico mais leve e acolhedor, com conversas descontraídas, boas risadas e, acima de tudo, com apoio constante nos momentos em que ele mais foi necessário.

Um agradecimento especial à minha orientadora, Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena, que, assim como tantas outras mulheres na ciência, foi fonte de inspiração e apoio fundamental ao longo dessa jornada. Sua orientação foi essencial para meu desenvolvimento pessoal e acadêmico, ao sempre me incentivar a questionar, aprender com os erros e reconhecer meus próprios limites com respeito e sensibilidade.

Ao meu amigo, Elias Lima, agradeço profundamente por estar ao meu lado com apoio incondicional ao longo de quase uma década. Faço das palavras do Elias as minhas: “Muita gente vem e vai na minha vida, mas você é a minha constante”.

Ao meu namorado, Eurico Edval, minha profunda gratidão. Obrigada por me ouvir e estar ao meu lado por todos esses anos.

Aos Professores Doutores Aristeu Rosendo Pontes Lima e Diego Rabelo da Costa, meus agradecimentos por gentilmente aceitarem compor a banca avaliadora deste trabalho.

Por fim, gostaria de agradecer ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) - Unilab, no qual fui bolsista durante um ano e meio, por viabilizar o desenvolvimento dessa pesquisa.

“Na vida, não há nada a temer, mas a entender.” (Marie Curie)

RESUMO

Sabe-se que a geometria de uma rede cristalina é um fator com influência direta no comportamento da estrutura de bandas eletrônicas de um material e, consequentemente, em suas propriedades físicas. O isolamento de amostras de grafeno de alta qualidade em 2004 impulsionou a pesquisa na área de materiais bidimensionais, o que levou à investigação teórica de possíveis cristais projetados com geometrias que resultassem em características desejadas. Nesse contexto, grande atenção vem sendo dada a sistemas que apresentam dispersões cônicas, similares ao grafeno, coexistindo com uma banda plana, tais como as redes de Lieb, Kagome, dados e $\alpha - T_3$. Esta última possui uma peculiaridade particularmente interessante, podendo variar entre as redes do grafeno e de dados através da mudança do parâmetro α , permitindo, assim, um estudo teórico que engloba sistemas análogos aqueles de pseudospins 1/2 e 1. Sabe-se que o tunelamento Klein, efeito relativístico onde elétrons são transmitidos com probabilidade 1 através de barreiras de potenciais eletrostáticos para incidência normal, foi observado pela primeira vez em um sistema de matéria condensada em amostras de grafeno. Ademais, estudos teóricos evidenciam que na rede de dados espera-se um tunelamento super Klein, isto é, para um valor específico de energia, tem-se transmissão total de elétrons para qualquer ângulo de incidência. Nesse sentido, pretende-se estudar como a transmissão é modificada à medida que o parâmetro α é variado de zero (rede do grafeno) a um (rede de dados), investigando a possibilidade de um tunelamento super Klein em um regime intermediário para outros valores de energia.

Palavras-chave: Rede $\alpha - T_3$. Dispersão cônica. Transmissão eletrônica. Tunelamento super Klein.

ABSTRACT

The geometry of a crystal lattice is known to have a direct impact on the electronic band structure of a material, and therefore on its physical properties. The isolation of high-quality graphene samples in 2004 propelled research in the field of two-dimensional materials, fostering theoretical investigations of engineered crystals with tailored geometries designed to exhibit specific properties. In this context, considerable attention has been directed toward systems featuring conical dispersions akin to graphene, alongside a flat band, including the Lieb, Kagome, dice, and $\alpha - T_3$ lattices. Notably, the $\alpha - T_3$ lattice exhibits a unique characteristic: by tuning the alpha parameter, it continuously interpolates between the graphene and dice lattices, thereby providing a versatile theoretical framework to explore both pseudospin 1/2 and pseudospin 1 systems, analogous to those observed in other Dirac-like materials. Klein tunneling, a relativistic phenomenon in which electrons transmit through electrostatic potential barriers with unit probability at normal incidence, was first experimentally observed in graphene-based condensed matter systems. Furthermore, theoretical investigations have revealed that the dice lattice exhibits super Klein tunneling, characterized by perfect electron transmission at a specific energy regardless of the angle of incidence. Motivated by this, the present work explores how electron transmission evolves as the α parameter varies continuously from zero (corresponding to the graphene lattice) to one (the dice lattice), with particular focus on the emergence of super Klein tunneling in intermediate regimes and at different energy values.

Keywords: Alpha- T_3 lattice. Dirac-like dispersion. Electronic transmission. Super Klein tunneling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação da rede α - T_3 , com parâmetro de <i>hopping</i> t entre os átomos da estrutura tipo favo de mel e <i>hopping</i> αt entre os sítios B (pontos laranja) e C (quadrados verdes). A célula unitária está destacada em cinza.	15
Figura 2 – A rede do modelo α - T_3 , mostrando os vetores de rede de Bravais $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ em termos da distância interatômica, a .	16
Figura 3 – Os vetores de rede recíproca do modelo $\alpha - T_3$ mostrando a zona de Brillouin hexagonal, os vetores de rede recíproca $\mathbf{b}_1$ e $\mathbf{b}_2$ e os pontos K e K' .	17
Figura 4 – Dispersão de energia adimensional $\varepsilon = E/t$ da rede α - T_3 em função dos vetores de onda k_x e k_y no espaço recíproco. Os eixos k_x e k_y estão em unidades de $1/a$, onde a é a distância interatômica. A figura mostra os seis cones de Dirac localizados nos vértices do hexágono da primeira zona de Brillouin, bem como a banda plana característica dessa rede.	18
Figura 5 – Energias dos níveis de Landau da rede $\alpha - T_3$ como função da energia adimensional e do parâmetro α para os primeiros valores de n . Os vales K e K' são mostrados em linhas e pontilhados, respectivamente. A banda plana está sendo mostrada em vermelho [34].	25
Figura 6 – Esquema para tunelamento através de uma barreira de potencial que começa em $x = 0$ e possui altura V_0 e largura d . O círculo azul representa o nível de Fermi e a seta azul indica a direção do vetor de onda. Escolhemos $0 < E < V_0$ e $s = 1$ e $s' = -1$ resultando em um salto np . Os ângulos associados com os vetores de onda estão em baixo da figura para cada região.	32
Figura 7 – Mapa de densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência ϕ (em graus) e do parâmetro α , para diferentes razões E/V_0 : (a) $E/V_0 = 0,25$, (b) $E/V_0 = 0,5$, (c) $E/V_0 = 0,75$ e (d) $E/V_0 = 1,5$. Os resultados foram obtidos considerando uma barreira de largura $d = 30$ nm e altura $V_0 = 0,2$ eV.	38
Figura 8 – Mapas de densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência ϕ (em graus) e da razão E/V_0 , para diferentes valores do parâmetro α e do ângulo φ : (a) $\alpha = 0$, (b) $\alpha = 1$ e (c) $\varphi = \pi/6$. Os resultados foram obtidos considerando uma barreira de largura $d = 30$ nm e altura $V_0 = 0,2$ eV.	39
Figura 9 – Probabilidade de transmissão em coordenadas polares para uma faixa de valores de α com $E/V_0 = 0.5$.	40
Figura 10 – Probabilidade de transmissão em coordenadas polares para $\alpha \approx 0.58$ para as razões $E/V_0 = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75$ e 0.95 .	40

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	9
1 INTRODUÇÃO	11
2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS FUNDAMENTAIS DA REDE $\alpha - T_3$	15
2.1 A rede $\alpha - T_3$	15
2.2 Dispersão de energia da rede $\alpha - T_3$	17
2.3 Hamiltoniano no regime de baixas energias para o modelo $\alpha - T_3$	19
2.4 Funções de onda rede $\alpha - T_3$	20
2.5 Rede $\alpha - T_3$ em um campo magnético uniforme	21
2.5.1 Níveis de Landau	22
2.5.2 Funções de onda da rede $\alpha - T_3$ na presença de um campo magnético uniforme	25
2.6 Tunelamento Klein na rede $\alpha - T_3$: teoria e modelo	26
3 TRANSMISSÃO ELETRÔNICA ATRAVÉS DE UMA BAR- REIRA DE POTENCIAL RETANGULAR	31
3.1 Barreira simples de potencial	31
4 CONCLUSÕES	42
REFERÊNCIAS	43

1 INTRODUÇÃO

O final do século XX foi um período dinâmico para a física, e dois marcos se destacam: em 1985, o físico israelense David Deutsch lançou as bases teóricas para a computação quântica através da publicação de seu artigo[1]. Pouco depois, em 1991, pesquisadores da *International Business Machines Corporation* (IBM) revolucionaram com a invenção da válvula de spin [2]. Eventos que, dentre outras descobertas realizadas no fim do século XX, participaram da consolidação da pesquisa nas áreas de spintrônica, computação quântica e sensores quânticos, momento no qual os cientistas passaram a explorar propriedades quânticas da matéria e o modo como o spin dos elétrons pode ser manipulado para fins de armazenamento e processamento de informações [3, 4, 5, 6, 7].

O spin do elétron foi descoberto através do experimento de Stern-Gerlach, sendo considerado uma propriedade intrínseca da matéria, assim como a carga elétrica [8]. Com o advento da spintrônica, essa característica pôde ser utilizada para o desenvolvimento de tecnologias alternativas de informação, mas com baixo custo energético [9]. Os sensores quânticos, por sua vez, fazem uso das propriedades quânticas da matéria para realizar a medição de quantidades físicas com alta precisão, despertando grande interesse científico, principalmente para a quantificação de campos magnéticos e detecção de radiação, tendo aplicações práticas em diversas áreas, como na magnetoencefalografia clínica, exame clínico não invasivo para registrar a atividade magnética do cérebro [10].

Atualmente, com o desenvolvimento tecnológico e o constante interesse pelo avanço da eletrônica, grande atenção vem sendo dada à pesquisa de materiais com propriedades desejadas, incluindo características topológicas, eletrônicas e magnéticas [11]. Trata-se de uma tarefa atribuída à Física do estado sólido, área que se consolida como disciplina independente em meados do século XX, a partir da aplicação da mecânica quântica ao estudo dos sólidos, com o objetivo de compreender as propriedades e os fenômenos que ocorrem nesses materiais [12].

Retrocedendo ao passado, os primeiros resquícios do estudo dos sólidos derivam-se da antiguidade, quando os filósofos gregos se questionavam sobre a natureza da matéria. Por muito tempo, a extração e processamento de materiais preciosos foram atividades endossadas pelos governantes absolutistas no século XIX, como forma de aumentar seu poder financeiro e força militar. No entanto, devido à necessidade de extrações difíceis, foram criadas academias especializadas como a Bergakademie Schemnitz (1770), do Império Austro-Húngaro, e a École des Mines (1783), na França. A formação científica nessas instituições combinava ensino teórico, observação empírica e aplicação prática [12].

Posteriormente, em 1794, foi inaugurada a fundação da École Polytechnique, instituição que realizou um grande marco no desenvolvimento da Física do estado sólido, através de suas pesquisas sobre a resistência dos materiais, elasticidade, condutividade

térmica e óptica dos sólidos, contribuindo assim para uma abordagem mais sistemática do estudo dos sólidos. A Física do estado sólido ganhou sua independência por volta do final do século XIX e início do século XX com o desenvolvimento da mecânica estatística e, posteriormente, da mecânica quântica. Assim, no século XX, ela se torna uma disciplina científica específica, com os avanços fundamentais ocorrendo entre os anos de 1920 e 1960, como a definição de estruturas de bandas, o estudo dos defeitos cristalinos e das discordâncias e o aprofundamento do conhecimento sobre fenômenos magnéticos e coletivos, como supercondutividade e superfluidez [13].

Os avanços tecnológicos em dispositivos eletrônicos dependem fortemente do desenvolvimento e da compreensão de materiais com propriedades físicas específicas. A Física do estado sólido desempenha um papel fundamental nesse quesito, ao investigar a estrutura, as interações e os comportamentos de materiais em escala atômica e molecular. Em particular, a pesquisa em materiais bidimensionais(2D) como o grafeno tem revelado fenômenos quânticos emergentes, incluindo supercondutividade, efeito Hall quântico e confinamento eletrônico, que abrem caminho para a criação de dispositivos com maior eficiência, velocidade e miniaturização [14, 15]. A exploração desses efeitos quânticos permite projetar novas funcionalidades em componentes eletrônicos, ópticos e de spintrônica, impulsionando o desenvolvimento de tecnologias inovadoras em áreas como computação quântica, sensores e nanoeletrônica [16].

A capacidade de controlar as propriedades óticas, eletrônicas e magnéticas de materiais através da aplicação de campos externos é responsável pelo surgimento de inúmeros equipamentos eletrônicos sem os quais a vida moderna como a conhecemos deixaria de existir. Desse fato, juntamente com o desejo genuíno de entender os fenômenos físicos em sistemas de matéria condensada, vem a justificativa pela constante busca de novos materiais cujas propriedades possam ser controladas por efeito de campo e utilizadas em novos dispositivos.

Embora o termo cristais costume remeter às aplicações conhecidas, como o diamante e o quartzo, caracterizados pelas faces planas e ângulos acentuados entre si, é importante ressaltar que os metais, assim como a maioria dos sólidos, também apresentam estrutura cristalina. A cristalinidade de um material não é determinada pela aparência superficial, mas principalmente pelo arranjo periódico e ordenado de seus íons. Ao abordarmos os cristais, é importante destacar certas características comuns a esses materiais. A rede de Bravais é definida como um arranjo periódico de pontos discretos, cuja distribuição e orientação mantêm um padrão uniforme, independentemente do ponto a partir do qual são observados. Denomina-se célula unitária primitiva o menor volume do espaço que, ao ser transladado ao longo de todos os vetores da rede de Bravais, preenche completamente o espaço, sem sobreposições nem lacunas. Além disso, a rede recíproca pode ser definida como o conjunto de todos os vetores de onda $\mathbf{K}$ capazes de gerar ondas

planas que preservam a periodicidade da rede de Bravais [17].

A descrição de um cristal físico baseia-se na compreensão de sua rede de Bravais subjacente, associada à configuração dos átomos, moléculas ou íons contidos em uma célula unitária primitiva específica. Ao se transitar da abstração dos pontos discretos da rede de Bravais para a análise de cristais reais, utiliza-se o termo estrutura cristalina. Esta estrutura corresponde à repetição periódica de uma mesma unidade física denominada base, que está posicionada em todos os pontos da rede de Bravais [17].

Dentro desse contexto, a produção do grafeno, o primeiro cristal 2D isolado experimentalmente [18, 19], teve o importante papel de abrir uma nova área de pesquisa e gerar intensa busca por novos materiais 2D [20, 21]. O grafeno atrai enorme atenção por ter um espectro eletrônico cônico no regime de baixas energias, o que permite que sua investigação teórica seja realizada a partir da equação de Dirac-Weyl que descreve o comportamento de partículas relativísticas de massa zero [22], sendo o primeiro sistema de matéria condensada a permitir o estudo de fenômenos de altas energias, tais como tunelamento Klein [23] e *zitterbewegung* [24].

No contexto da Mecânica Clássica, uma partícula com energia diferente de zero que incide sobre uma barreira de potencial possui probabilidade nula de atravessá-la. Em contraste, na Mecânica Quântica, o problema de espalhamento apresenta um comportamento distinto, pois mesmo que a energia da partícula seja inferior à altura da barreira, existe uma probabilidade finita de que ela a atravesse, caracterizando o chamado tunelamento quântico [25]. É sabido que o tunelamento Klein, efeito relativístico onde elétrons são transmitidos com probabilidade 1 através de barreiras de potenciais eletrostáticas para incidência normal, foi observado pela primeira vez em um sistema de matéria condensada em amostras de grafeno [26]. Em adição, estudos teóricos mostram que na rede de dados espera-se um tunelamento super Klein [27], ou seja, para um valor específico de energia, a saber, quando o portador tiver uma energia igual a metade da energia da barreira, tem-se transmissão total de elétrons para qualquer ângulo de incidência.

Nesse contexto, grande atenção vem sendo dada a sistemas que apresentam dispersões cônicas, similares ao grafeno, coexistindo com uma banda plana, tais como as redes de Lieb, Kagome, dados e $\alpha - T_3$. Esta última possui uma peculiaridade particularmente interessante, podendo variar continuamente entre a rede do grafeno e a de dados através da mudança do parâmetro α , permitindo, assim, um estudo teórico da transição contínua entre sistemas de pseudospins $1/2$ e 1 .

Foi demonstrado que a rede $\alpha - T_3$ pode ser obtida em $Hg_{1-x}Cd_xTe$ em uma dopagem crítica com um valor intermediário do parâmetro $\alpha = 1/\sqrt{3}$. Já a rede óptica $\alpha - T_3$ foi prevista teoricamente, e o valor do parâmetro α pode ser variado nesses sistemas [28]. O caso limite em que $\alpha = 1$ foi obtido através de aprisionamento de átomos frios em

redes óticas e foi verificado que suas propriedades são, de fato, descritas pelo Hamiltoniano de Dirac-Weyl com pseudospin 1 [29]. O modelo $\alpha - T_3$ foi inicialmente proposto para sistemas de átomos frios em um artigo de 2014 [28] com ênfase na transição diamagnética [30] ($\alpha = 0$) para a paramagnética [31, 32] ($\alpha = 1$) na resposta magnética orbital da rede.

Esse trabalho visa estudar a transmissão eletrônica na rede $\alpha - T_3$ através de uma barreira simples de potencial. No Capítulo 2, abordaremos as propriedades eletrônicas fundamentais da rede $\alpha - T_3$. Partimos do hamiltoniano *tight-binding* [33], e calculamos a dispersão de energia para esta rede. Em seguida, ao expandirmos em torno dos pontos de Dirac nos vales K e K', obtemos a forma do hamiltoniano em baixas energias. Posteriormente, após encontrar as funções de onda para a rede, determinamos a corrente de probabilidade para os dois casos limites. No Capítulo 3, calculamos o coeficiente de transmissão para uma barreira simples de potencial. Por fim, realizamos um estudo sobre a influência do parâmetro α no coeficiente de transmissão. No Capítulo 4, apresentamos sucintamente nossas conclusões.

2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS FUNDAMENTAIS DA REDE $\alpha - T_3$

Neste capítulo, serão apresentadas as principais características da rede $\alpha - T_3$, incluindo sua estrutura, dispersão de energia do modelo e a formulação do hamiltoniano para o regime de baixas energias. Ademais, serão analisadas as funções de onda do sistema, bem como os níveis de Landau e suas respectivas funções de onda na presença de um campo magnético uniforme.

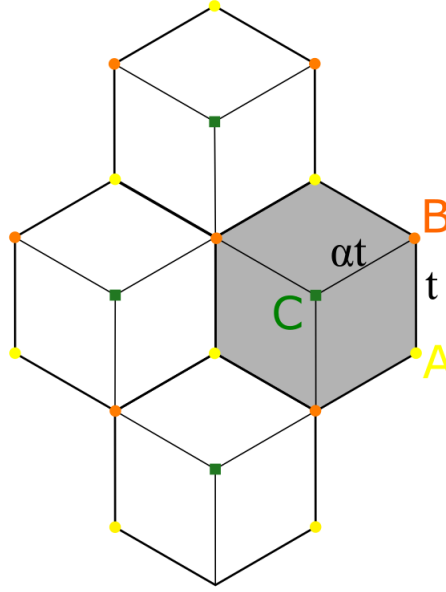


Figura 1: Representação da rede $\alpha - T_3$, com parâmetro de *hopping* t entre os átomos da estrutura tipo favo de mel e *hopping* αt entre os sítios B (pontos laranja) e C (quadrados verdes). A célula unitária está destacada em cinza.

2.1 A rede $\alpha - T_3$

A rede $\alpha - T_3$ está sendo mostrada na Figura 1. Sua célula unitária, sombreada em cinza, contém três sítios, sendo eles A (pontos amarelos), B (pontos laranja) e C (quadrados verdes). Quando comparada à estrutura do grafeno, pode ser vista como sua extensão, diferenciando-se devido à adição de um sítio localizado no centro de cada hexágono, sítio C, este que, por sua vez, se acopla somente a uma das subredes triangulares que formam a rede favo de mel do grafeno. Sua estrutura pode ser entendida como três redes triangulares transladadas, onde cada triângulo é mostrado em cores diferentes.

Os vetores da rede de Bravais são mostrados na figura 3, e podem ser escritos como:

$$\mathbf{a}_1 = -\frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{3a}{2}\hat{y} \quad (2.1)$$

e

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{3a}{2}\hat{y}, \quad (2.2)$$

com a sendo a distância interatômica e o módulo dos vetores de rede dados por $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a$.

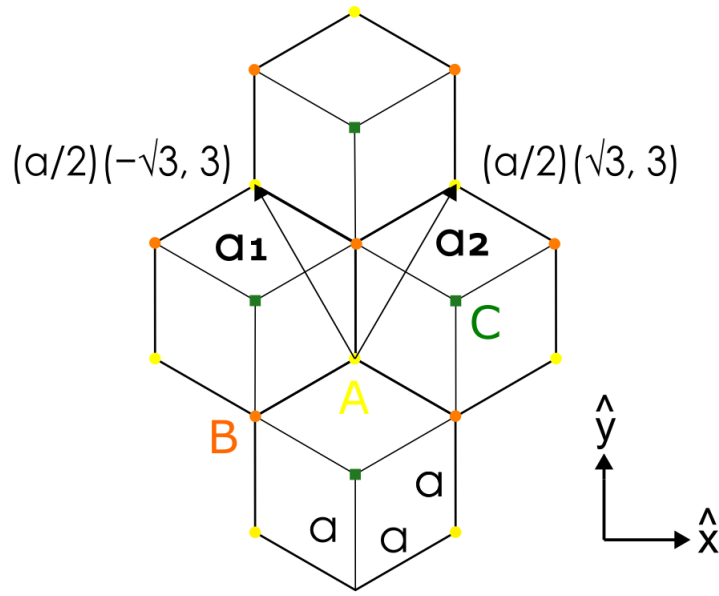


Figura 2: A rede do modelo α - T_3 , mostrando os vetores de rede de Bravais $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ em termos da distância interatômica, a .

No espaço recíproco, os vetores da rede recíproca (usando $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1)$) são escritos como:

$$\mathbf{b}_1 = \left(-\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (2.3)$$

e

$$\mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3a} \right). \quad (2.4)$$

Os pontos K e K' estão localizados em $\left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)$ e $\left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)$, respectivamente. A Figura 3 mostra os pontos de Dirac e a rede recíproca.

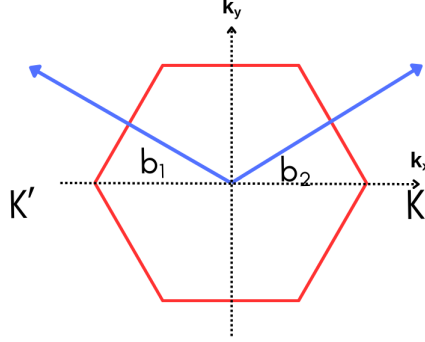


Figura 3: Os vetores de rede recíproca do modelo $\alpha - T_3$ mostrando a zona de Brillouin hexagonal, os vetores de rede recíproca $\mathbf{b}_1$ e $\mathbf{b}_2$ e os pontos K e K' .

2.2 Dispersão de energia da rede $\alpha - T_3$

Assim como usualmente feito com o grafeno, é possível utilizar um modelo simples de *tight-binding* para caracterizar as propriedades da rede cristalina. Este modelo assume que os elétrons estão fortemente ligados aos seus respectivos átomos e são capazes de saltar de sítio em sítio através de um parâmetro de *hopping* [17]. Ao analisar a rede $\alpha - T_3$ na Figura 1, nota-se que o salto de A para B acontece através do parâmetro t , e no caso de B para C, ocorre por intermédio de αt .

Partindo do Hamiltoniano *tight-binding* [34] dado pela Eq. (2.5) podemos chegar à dispersão de energia da rede, este dado por:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \cos(\varphi) & 0 \\ f_{\mathbf{k}}^* \cos(\varphi) & 0 & f_{\mathbf{k}} \sin(\varphi) \\ 0 & f_{\mathbf{k}}^* \sin(\varphi) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

onde $\tan \varphi = \alpha$ e $f_{\mathbf{k}} = -t(1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2})$. Além disso, podemos encontrar os autovalores de $\hat{H}$ calculando o seguinte determinante:

$$\det(\hat{H}(\mathbf{k}) - \epsilon I) = 0, \quad (2.6)$$

sendo ϵ autovalores e I a matriz identidade 3×3 . Assim,

$$\det \begin{pmatrix} -\epsilon & f_{\mathbf{k}}^* \cos \varphi & 0 \\ f_{\mathbf{k}}^* \cos \varphi & -\epsilon & f_{\mathbf{k}} \sin \varphi \\ 0 & f_{\mathbf{k}}^* \sin \varphi & -\epsilon \end{pmatrix} = 0. \quad (2.7)$$

e resolvendo para ϵ , encontramos:

$$\epsilon = 0, \pm |f_{\mathbf{k}}|. \quad (2.8)$$

Os valores encontrados na Eq. (2.8) mostram a presença de três bandas de energia para a rede $\alpha - T_3$. Das Eqs. (2.1), (2.2) e $f_{\mathbf{k}}$, podemos encontrar $|f_{\mathbf{k}}|$ tal como:

$$|f_{\mathbf{k}}| = t \left| 1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \right|, \quad (2.9)$$

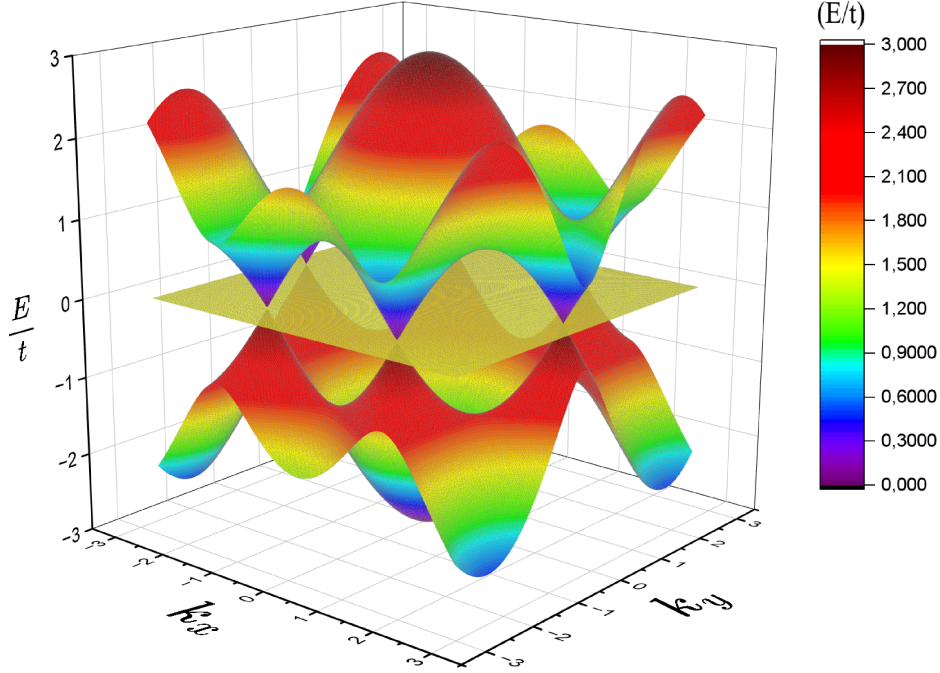


Figura 4: Dispersão de energia adimensional $\varepsilon = E/t$ da rede α -T₃ em função dos vetores de onda k_x e k_y no espaço recíproco. Os eixos k_x e k_y estão em unidades de $1/a$, onde a é a distância interatômica. A figura mostra os seis cones de Dirac localizados nos vértices do hexágono da primeira zona de Brillouin, bem como a banda plana característica dessa rede.

$$|f_{\mathbf{k}}| = t \left| 1 + 2 \cos \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x \right) \cos \left(\frac{3a}{2} k_y \right) - 2i \cos \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x \right) \sin \left(\frac{3a}{2} k_y \right) \right|. \quad (2.10)$$

Elevando ambos os lados da equação ao quadrado, obtemos que:

$$|f_{\mathbf{k}}|^2 = t^2 \left| 1 + 2 \cos \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x \right) \cos \left(\frac{3a}{2} k_y \right) - 2i \cos \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x \right) \sin \left(\frac{3a}{2} k_y \right) \right|^2, \quad (2.11)$$

e simplificando a expressão dentro do módulo, tem-se que:

$$|f_{\mathbf{k}}|^2 = t^2 \left(3 + 4 \cos \left(\frac{3a}{2} k_y \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x \right) + 2 \cos \left(\sqrt{3}a k_x \right) \right), \quad (2.12)$$

o que resulta em

$$|f_k| = t \sqrt{3 + 4 \cos\left(\frac{3a}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\right) + 2 \cos(\sqrt{3}ak_x)}. \quad (2.13)$$

Note que a dispersão de energia da Eq. (2.8) é idêntica a dispersão das bandas de valência e condução do grafeno, diferenciando-se apenas pela presença de uma banda plana, que corta os pontos de Dirac, isto é, onde as duas bandas se encontram, assim como mostrado na Figura 4.

2.3 Hamiltoniano no regime de baixas energias para o modelo $\alpha-T_3$

O regime de baixas energias é uma situação física onde as energias envolvidas do sistema são muito menores do que alguma escala característica desse sistema. Próximo aos pontos de Dirac, a energia do elétron é muito pequena comparada à largura total das bandas. Desse modo, usaremos um modelo efetivo que descreve somente o que acontece nos pontos de interesse. Nesta subseção, expandiremos $\mathbf{f}_k$ na Eq. (2.13) em torno do ponto $K\left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$. Seja $f(\vec{K})$ dado por:

$$f(\vec{K}) = -t \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}K_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{3K_y a}{2}\right) - 2i \cos\left(\frac{\sqrt{3}K_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{3K_y a}{2}\right) \right), \quad (2.14)$$

temos, ao fazer a expansão em série de Taylor, considerando apenas os termos de primeira ordem, a seguinte expressão:

$$f(\delta\vec{K}) \approx f(\vec{K}_1) + \left. \frac{\partial f}{\partial K_x} \right|_{\vec{K}=\vec{K}_1} (K_x - K_{1x}) + \left. \frac{\partial f}{\partial K_y} \right|_{\vec{K}=\vec{K}_1} (K_y - K_{1y}), \quad (2.15)$$

e substituindo os pontos:

$$f(\delta\vec{K}) \approx 0 + \frac{3at}{2} (K_x - K_{1x}) - \frac{3iat}{2} (K_y - K_{1y}), \quad (2.16)$$

que resultam em:

$$f(\delta\vec{K}) \approx \frac{3at}{2} (K_x - ik_y), \quad (2.17)$$

Implicando em:

$$f_{K+\mathbf{k}} = \frac{3at}{2} (k_x - ik_y). \quad (2.18)$$

Definindo a velocidade de Fermi v_f como:

$$v_F = \frac{3at}{2\hbar}, \quad (2.19)$$

obtemos a expressão final para $f(\delta\vec{K})$, dada por

$$f_{K+\mathbf{k}} = \hbar v_F(k_x - ik_y). \quad (2.20)$$

Reescrevendo a Eq. (2.20) de forma linearizada, chegamos em

$$f_{K+\mathbf{k}} = \hbar v_F(\xi k_x - ik_y), \quad (2.21)$$

onde $\mathbf{k}$ é medido a partir dos pontos $K(\xi=1)$ ou $K'(\xi=-1)$ como sua origem, ao invés do centro da zona de Brillouin hexagonal. Desse modo, podemos reescrever a Eq. (2.8) para o regime de baixas energias, obtendo:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = 0, \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|. \quad (2.22)$$

Como esperado, há três bandas de energia: uma banda plana com energia $\epsilon_{\mathbf{k},0} = 0$, e dois cones com energia $\epsilon_{\mathbf{k},s} = s\hbar v_F k$ com $s = \pm 1$ para a banda de valência e condução, respectivamente. Assim, podemos escrever uma nova expressão para o hamiltoniano da Eq. (2.5), agora para o regime de baixas energias, tal como:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \cos(\varphi) & 0 \\ f_{\mathbf{k}}^* \cos(\varphi) & 0 & f_{\mathbf{k}} \sin(\varphi) \\ 0 & f_{\mathbf{k}}^* \sin(\varphi) & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{k}, \quad (2.23)$$

onde o ângulo φ está relacionado com a força do acoplamento α , com $\alpha = \tan \varphi$ e as matrizes de pseudospin dadas por:

$$S_x = \xi \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi & 0 \\ \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S_y = -i \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi & 0 \\ -\cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

2.4 Funções de onda rede alpha- T_3

Da equação de autovalores para o hamiltoniano $\hat{H}(\mathbf{k})$ da Eq. (2.23) com os autovalores dados Eq. (2.8), temos:

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & |f_k| & 0 \\ 0 & 0 & -|f_k| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f_k \cos \varphi & 0 \\ f_k^* \cos \varphi & 0 & f_k \sin \varphi \\ 0 & f_k^* \sin \varphi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Note que qualquer múltiplo de um vetor, ainda é um vetor. Escolhendo $a_1 = \sin \varphi e^{i\theta_k}$, onde $f_k = |f_k| e^{i\theta_k}$, chegamos em

$$a_1 = \sin \varphi e^{i\theta_k}, a_2 = 0 \quad \text{e} \quad a_3 = -\cos \varphi e^{-i\theta_k}, \quad (2.26)$$

obtendo a seguinte expressão para a banda plana

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} \sin \varphi e^{i\theta_k} \\ 0 \\ -\cos \varphi e^{-i\theta_k} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Em seguida, para obter as funções de onda para os cones, faremos um processo análogo definindo $b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, obtendo:

$$b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{i\theta_k}, b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad b_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \varphi^{-i\theta_k}, \quad (2.28)$$

e

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{i\theta_k}, c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \varphi^{-i\theta_k}. \quad (2.29)$$

Dessa forma, as funções de onda para a banda de condução e banda de valência são escritas da forma

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi e^{i\theta_k} \\ s \\ -\sin \varphi e^{-i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

com $s = \pm 1$ para a banda de valência e banda de condução, respectivamente. Além disso, $\theta_{\mathbf{k}}$ é o ângulo associado ao momento $\mathbf{k}$ de modo que $f_k = |f_{\mathbf{k}}|e^{i\theta_k}$ com $f_{\mathbf{k}}$ dado pela Eq. (2.21).

2.5 Rede $\alpha - T_3$ em um campo magnético uniforme

Nesta seção, analisaremos os efeitos da aplicação de um campo magnético uniforme B , perpendicular ao plano da rede. Derivaremos o hamiltoniano correspondente e o utilizaremos para calcular os níveis de Landau e as funções de onda associadas à rede. Trabalharemos no calibre de Landau, em que o potencial vetor é dado por $\mathbf{A} = By \hat{x}$. Nesse caso, o campo magnético resultante é $\nabla \times \mathbf{A} = B \hat{z}$. Para incorporar os efeitos do campo magnético no hamiltoniano, utilizamos a substituição de Peierls usual: $\hbar \mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}$, onde $\mathbf{k}$ representa o autovalor do operador momento e $\hat{\mathbf{p}}$, o próprio operador de momento. Sendo o hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H} = v_F \vec{S} \cdot \vec{p}, \quad (2.31)$$

o acoplamento mínimo

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A} = -i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A}. \quad (2.32)$$

e escolhendo o calibre de Landau, tal que

$$\vec{A} = (0, Bx, 0) \quad \Rightarrow \quad \vec{B} = B\hat{z}, \quad (2.33)$$

chegamos na seguinte expressão para o hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = v_F S_x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + v_F S_y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + eBx \right). \quad (2.34)$$

Substituindo S_x e S_y , dados na Eq. (2.24), obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi \partial_x & 0 \\ \cos \varphi \partial_x & 0 & \sin \varphi \partial_x \\ 0 & \sin \varphi \partial_x & 0 \end{pmatrix} \\ & -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi \left(-i\partial_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \\ \cos \varphi \left(i\partial_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 & \sin \varphi \left(-i\partial_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \\ 0 & \sin \varphi \left(i\partial_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

o que resulta, finalmente, à expressão

$$\mathcal{H} = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi \left(\partial_x - i\partial_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \\ \cos \varphi \left(\partial_x + i\partial_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 & \sin \varphi \left(\partial_x - i\partial_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \\ 0 & \sin \varphi \left(\partial_x + i\partial_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

2.5.1 Níveis de Landau

Na presença de um campo magnético, o movimento das partículas carregadas é quantizado, fazendo com que elas se organizem em estados de energia discretos conhecidos como níveis de Landau. O hamiltoniano(2.36) não depende explicitamente da coordenada y , sendo assim, é fácil notar que isso implica em $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_y] = 0$. Consequentemente, podemos escrever a função de onda na forma:

$$\Psi_{A(B)(C)} = e^{ik_y y} \psi_{A(B)(C)}(x), \quad (2.37)$$

com A, B, e C sendo os sítios da rede. Da equação de Schrödinger:

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi, \quad (2.38)$$

temos ao substituir Ψ da Eq. (2.37) e $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})$ da Eq. (2.36) que:

$$\begin{aligned}
 & -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \cos \varphi \left(\frac{d}{dx} + k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \\ \cos \varphi \left(\frac{d}{dx} - k_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 & \sin \varphi \left(\frac{d}{dx} + k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \\ 0 & \sin \varphi \left(\frac{d}{dx} - k_y - \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix} \\
 & = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

Definindo a energia adimensional:

$$\mathcal{E} \equiv \frac{E}{\hbar v_F}, \tag{2.40}$$

podemos escrever a equação de Schrödinger desacoplando as suas componentes, tal como:

$$\cos \varphi \left[\frac{d\psi_B}{dx} + \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_B \right] = i\mathcal{E} \psi_A, \tag{2.41}$$

$$\cos \varphi \left[\frac{d\psi_A}{dx} - \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_A \right] + \sin \varphi \left[\frac{d\psi_C}{dx} + \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_C \right] = i\mathcal{E} \psi_B, \tag{2.42}$$

e

$$\sin \varphi \left[\frac{d\psi_B}{dx} - \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_B \right] = i\mathcal{E} \psi_C. \tag{2.43}$$

Das Eqs. 2.41 e 2.43, obtemos:

$$\psi_A = \frac{\cos \varphi}{i\mathcal{E}} \left[\frac{d\psi_B}{dx} + \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_B \right], \tag{2.44}$$

$$\frac{d\psi_A}{dx} = \frac{\cos \varphi}{i\mathcal{E}} \left[\frac{d^2\psi_B}{dx^2} + \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \frac{d\psi_B}{dx} + \frac{eB}{\hbar} \psi_B \right], \tag{2.45}$$

$$\psi_C = \frac{\sin \varphi}{i\mathcal{E}} \left[\frac{d\psi_B}{dx} - \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \psi_B \right], \tag{2.46}$$

e

$$\frac{d\psi_C}{dx} = \frac{\sin \varphi}{i\mathcal{E}} \left[\frac{d^2\psi_B}{dx^2} - \left(k_y + \frac{eB}{\hbar} x \right) \frac{d\psi_B}{dx} - \frac{eB}{\hbar} \psi_B \right]. \tag{2.47}$$

Substituindo as Eqs. (2.44), (2.45), (2.46) e (2.47) na Eq. (2.42), obtemos:

$$\frac{d^2\psi_B}{dx^2} + (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \frac{\ell B}{\hbar} \psi_B - \left(\frac{k_y + \ell B x}{\hbar} \right)^2 \psi_B = -\varepsilon^2 \psi_B. \tag{2.48}$$

Definindo:

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}, \quad \bar{x} = \frac{x}{\ell_B} \tag{2.49}$$

e as derivadas:

$$\frac{d\psi_B}{dx} = \frac{1}{\ell_B} \frac{d\psi_B}{d\bar{x}}, \quad (2.50)$$

e

$$\frac{d^2\psi_B}{dx^2} = \frac{1}{\ell_B^2} \frac{d^2\psi_B}{d\bar{x}^2}. \quad (2.51)$$

E substituindo as Eqs. 2.49 e 2.51 na Eq. (2.48), temos que:

$$\frac{1}{\ell_B^2} \frac{d^2\psi_B}{d\bar{x}^2} - \frac{1}{\ell_B^2} (k_y \ell_B + \bar{x})^2 \psi_B + \left[\frac{\varepsilon^2 + \cos(2\varphi)}{\ell_B^2} \right] \psi_B = 0 \quad (2.52)$$

Multiplicando a equação acima por ℓ_B^2 , tem-se que

$$\left[\frac{d^2}{d\bar{x}^2} - (k_y \ell_B + \bar{x})^2 + \varepsilon^2 \ell_B^2 + \cos(2\varphi) \right] \psi_B = 0. \quad (2.53)$$

Note que a Eq. (2.53) é bem conhecida e só tem soluções físicas que convergem para todos os valores de $\bar{x}$ quando

$$\varepsilon_n^2 \ell_B^2 + \cos(2\varphi) = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.54)$$

sendo n um número inteiro não negativo. Voltando aos parâmetros originais, chegamos na seguinte expressão para a energia dos níveis de Landau:

$$E_n = \frac{\hbar v_F}{\ell_B} \sqrt{2n + 1 - \cos(2\varphi)}. \quad (2.55)$$

Além disso, podemos escrever a energia em função do seno, pela identidade trigonométrica:

$$1 - \cos(2\varphi) = 2 \sin^2 \varphi, \quad (2.56)$$

chegando em:

$$E_n = \frac{\sqrt{2} \hbar v_F}{\ell_B} \sqrt{n + \sin^2 \varphi}. \quad (2.57)$$

A Figura 5 apresenta os níveis de Landau para os primeiros valores de n , destacando os casos limites: para $\alpha = 0$, recuperam-se os níveis de Landau do grafeno, enquanto para $\alpha = 1$, obtemos os níveis correspondentes à rede de dados.

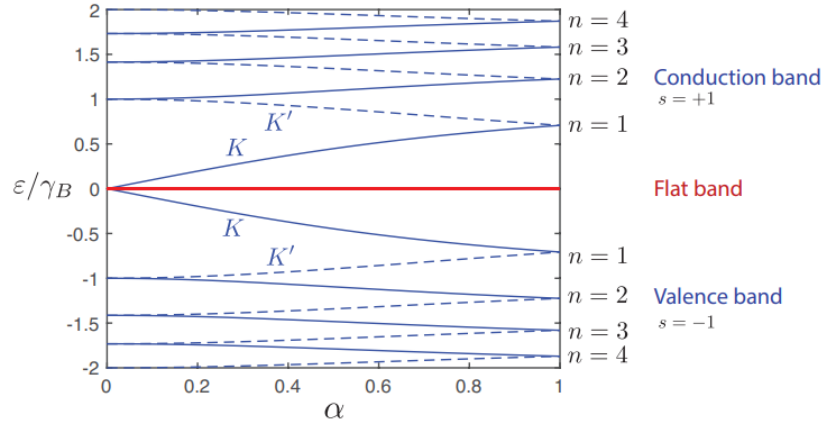


Figura 5: Energias dos níveis de Landau da rede $\alpha-T_3$ como função da energia adimensional e do parâmetro α para os primeiros valores de n . Os vales K e K' são mostrados em linhas e pontilhadas, respectivamente. A banda plana está sendo mostrada em vermelho [34].

2.5.2 Funções de onda da rede $\alpha - T_3$ na presença de um campo magnético uniforme

Consideramos a equação diferencial para o componente da função de onda ψ_B dada pela Eq. (2.53), tem-se que a solução é expressa em termos dos polinômios de Hermite $H_n(\bar{x})$, dada por

$$\psi_B(\tilde{x}) = A_n e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} H_n(\tilde{x}), \quad (2.58)$$

onde A_n é uma constante de normalização e $\tilde{x} = k_y l_B + \bar{x}$. A partir de ψ_B , podemos determinar ψ_A usando a relação (2.44):

$$\psi_A = \frac{\cos \varphi}{i \varepsilon l_B} \left[\frac{d\psi_B}{d\bar{x}} + \tilde{x} \psi_B \right]. \quad (2.59)$$

Assim, chegamos na seguinte expressão para ψ_A :

$$\psi_A = B_n \frac{\cos \varphi}{i \varepsilon l_B} e^{-\frac{(\tilde{x})^2}{2}} [2n H_{n-1}(\tilde{x}) - (k_y l_B + \bar{x}) H_n(\tilde{x}) + (k_y l_B + \bar{x}) H_n(\tilde{x})]. \quad (2.60)$$

Note que os termos $-(k_y l_B + \bar{x}) H_n(\bar{x})$ e $(k_y l_B + \bar{x}) H_n(\bar{x})$ se cancelam, implicando em

$$\psi_A = B_n \frac{2n \cos \varphi}{i \varepsilon l_B} e^{-\frac{(k_y l_B + \bar{x})^2}{2}} H_{n-1}(\tilde{x}). \quad (2.61)$$

De modo análogo, a função ψ_C dada pela Eq. (2.46):

$$\psi_C = \frac{\sin \varphi}{i \varepsilon} \left[\frac{d\psi_B}{d\bar{x}} - (k_y + \bar{x}) \psi_B \right]. \quad (2.62)$$

Pode ser determinada ao substituir a derivada e organizar os termos, tal como:

$$\psi_C = C_n \frac{\sin \varphi}{i\varepsilon} e^{-\frac{(k_y l_B + \bar{x})^2}{2}} [2nH_{n-1}(\bar{x}) - (k_y l_B + \bar{x})H_n(\tilde{x}) - (k_y l_B + \bar{x})H_n(\bar{x})]. \quad (2.63)$$

Usando a seguinte relação de recorrência para os polinômios de Hermite

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (2.64)$$

chegamos na expressão final de ψ_C :

$$\psi_C = \frac{A_n \sin \varphi}{i\varepsilon} e^{-\frac{(k_y l_B + \bar{x})^2}{2}} [-H_{n+1}(\tilde{x})]. \quad (2.65)$$

Dessa forma, a função de onda total $\Psi_n(x, y)$ pode ser expressa como

$$\Psi_n(x, y) = D_n e^{ik_y y} e^{-\frac{(k_y l_B + \bar{x})^2}{2}} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

com componentes dadas por:

$$\psi_A = \frac{2n \cos \varphi}{i\varepsilon l_B} H_{n-1}(\tilde{x}), \quad (2.67)$$

$$\psi_B = H_n(\tilde{x}), \quad (2.68)$$

$$\psi_C = \frac{\sin \varphi}{i\varepsilon} [-H_{n+1}(\tilde{x})], \quad (2.69)$$

e constante de normalização D_n dada por:

$$D_n = \left[L_y l_B \sqrt{\pi} \left(\frac{(2n \cos \varphi)^2}{\varepsilon^2 l_B^2} \cdot 2^{n-1} (n-1)! + 2^n n! + \frac{(\sin \varphi)^2}{\varepsilon^2} \cdot 2^{n+1} (n+1)! \right) \right]^{-1/2}, \quad (2.70)$$

sendo n um número inteiro não negativo e L_y o comprimento do sistema.

2.6 Tunelamento Klein na rede $\alpha - T_3$: teoria e modelo

O hamiltoniano de baixas energias para o modelo $\alpha - T_3$ pode ser escrito em torno de um ponto K na zona de Brillouin hexagonal como:

$$\hat{H} = \hat{H}_k + V(x)I, \quad (2.71)$$

onde $\hat{H}_k$, dada pela Eq. (2.23) é a energia cinética, $V(x)$ é o potencial e I é a matriz identidade 3×3 .

Para qualquer $V(x) = V$ que é independente de x , a função de onda para o

ponto K é dada por:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi e^{i\phi} \\ s \\ -\sin \varphi e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

com energia $\epsilon_{\mathbf{k},s} = s\hbar v_F k$ e $s = \pm 1$ para a banda de valência e banda de condução, respectivamente. Além disso, o ângulo ϕ é definido por $f_k = |f_k|e^{i\phi}$.

Para determinar a transmissão através de uma barreira de potencial, precisamos encontrar as condições de contorno para as funções de onda nessas interfaces da barreira. Desse modo, para encontrar a relação entre as funções de onda em cada região, usaremos a substituição de Peierls ($k \rightarrow \hat{p}$) e integraremos a equação de autovalor $\hat{H}\Psi = E\Psi$ sobre um pequeno intervalo $x = [-\epsilon, \epsilon]$ e permitir que esse intervalo vá a zero.

Partindo da equação de autovalor $\hat{H}\Psi = E\Psi$, e substituindo $\hat{H}$ da Eq. (2.71), temos:

$$\begin{pmatrix} V(x) & \cos \varphi v_f(\xi p_x - ip_y) & 0 \\ \cos \varphi v_f(\xi p_x + ip_y) & V(x) & \sin \varphi v_f(\xi p_x - ip_y) \\ 0 & \sin \varphi v_f(\xi p_x + ip_y) & V(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

onde

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.74)$$

e

$$p_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}. \quad (2.75)$$

Daí, obtemos as seguintes expressões:

$$V(x)\psi_A + \cos \varphi \hbar v_f \left(-i\xi \frac{\partial \psi_B}{\partial x} - \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \right) = E\psi_A, \quad (2.76)$$

$$V(x)\psi_B + \cos \varphi \hbar v_f \left(-i\xi \frac{\partial \psi_A}{\partial x} + \frac{\partial \psi_A}{\partial y} \right) + \sin \varphi \hbar v_F \left(-i\xi \frac{\partial \psi_C}{\partial x} - \frac{\partial \psi_C}{\partial y} \right) = E\psi_B \quad (2.77)$$

e

$$V(x)\psi_C + \sin \varphi \hbar v_F \left(-i\xi \frac{\partial \psi_B}{\partial x} + \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \right) = E\psi_C. \quad (2.78)$$

Integrando as Eqs. (2.76), (2.77) e (2.78) em x de $-\epsilon$ a ϵ , temos:

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi_A(x, y) dx - i\xi \hbar v_F \cos \varphi \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_B(x, y)}{\partial x} dx - \hbar v_F \cos \varphi \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_B(x, y)}{\partial y} dx \\ = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi_A(x, y) dx, \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi_B(x, y) dx - \cos \varphi \hbar v_F i \xi \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_A}{\partial x} dx + \cos \varphi \hbar v_F \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_A(x, y)}{\partial y} dx \\
& - \sin \varphi \hbar v_F i \xi \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_C(x, y)}{\partial x} dx - \sin \varphi \hbar v_F \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_C(x, y)}{\partial y} dx \\
& = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi_B(x, y) dx,
\end{aligned} \tag{2.80}$$

e

$$\begin{aligned}
& \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi_C(x, y) dx - \sin \varphi \hbar v_F i \xi \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_B(x, y)}{\partial x} dx + \sin \varphi \hbar v_F \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial \psi_B(x, y)}{\partial y} dx \\
& = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi_C(x, y) dx.
\end{aligned} \tag{2.81}$$

Tomando o limite de $\epsilon \rightarrow 0$, considerando que as amplitudes de probabilidade devem ser integráveis, para descontinuidades finitas no potencial, temos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi_B(-\epsilon, y) = \psi_B(\epsilon, y), \tag{2.82}$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} -i \xi \hbar v_F \{ \cos \varphi [\psi_A(\epsilon, y) - \psi_A(-\epsilon, y)] + \sin \varphi [\psi_C(\epsilon, y) - \psi_C(-\epsilon, y)] \} = 0, \tag{2.83}$$

e

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\cos \varphi \psi_A(\epsilon, y) + \sin \varphi \psi_C(\epsilon, y)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\cos \varphi \psi_A(-\epsilon, y) + \sin \varphi \psi_C(-\epsilon, y)]. \tag{2.84}$$

Isto é, a componente ψ_B deve ser contínua, mas ψ_A e ψ_C separadamente não, o que podemos garantir é que $\cos \varphi \psi_A + \sin \varphi \psi_C$ é contínua na descontinuidade do potencial. Desse modo, as expressões finais para as condições de contorno são:

$$\psi_B(-\epsilon) = \psi_B(\epsilon), \tag{2.85}$$

e

$$\cos \varphi \psi_A(\epsilon) + \sin \varphi \psi_C(\epsilon) = \cos \varphi \psi_A(-\epsilon) + \sin \varphi \psi_C(-\epsilon), \tag{2.86}$$

para potenciais $V(x)$ não divergentes.

Posteriormente, a fim de compreender as condições de contorno da rede, calcularemos a corrente de probabilidade usando a equação de onda $-i \partial_t \psi = \hat{H} \psi$ e a equação da conservação da probabilidade $\partial_t |\psi|^2 = -\nabla \cdot \mathbf{j}$.

Sejam o hamiltoniano para baixas energias e a equação de Dirac efetiva dados por:

$$H = v_F \tilde{\mathbf{S}} \cdot \tilde{\mathbf{p}} + V_0 \hat{I}, \tag{2.87}$$

e

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (2.88)$$

respectivamente. Além disso, sabendo que:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = \frac{\partial (\psi_A^* \psi_A + \psi_B^* \psi_B + \psi_C^* \psi_C)}{\partial t}, \quad (2.89)$$

obtemos:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_A}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_B}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_C}{\partial t} \end{pmatrix} = \left(-i\hbar v_F S_x \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar v_F S_y \frac{\partial}{\partial y} + V_0 \hat{I} \right) \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

implicando em

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_A}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_B}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_C}{\partial t} \end{pmatrix} = -v_F \begin{pmatrix} \frac{iV_0}{\hbar v_F} & \cos \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) & 0 \\ \cos \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & \frac{iV_0}{\hbar v_F} & \sin \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & \sin \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & \frac{iV_0}{\hbar v_F} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_C \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

de modo que

$$\frac{\partial \psi_A}{\partial t} = -\frac{iV_0}{\hbar} \psi_A - v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_B}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \right), \quad (2.92)$$

e seu complexo conjugado

$$\frac{\partial \psi_A^*}{\partial t} = \frac{iV_0}{\hbar} \psi_A^* - v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \right). \quad (2.93)$$

Daí, podemos encontrar:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_A^*}{\partial t} \psi_A + \frac{\partial \psi_A}{\partial t} \psi_A^* &= -\frac{iV_0}{\hbar} |\psi_A|^2 - v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} \psi_A + i \frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \psi_A \right) \\ &\quad + \frac{iV_0}{\hbar} |\psi_A|^2 - v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_B}{\partial x} \psi_A^* - i \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \psi_A^* \right). \end{aligned} \quad (2.94)$$

Simplificando:

$$\frac{\partial \psi_A^*}{\partial t} \psi_A + \frac{\partial \psi_A}{\partial t} \psi_A^* = -2v_F \cos \varphi \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} \psi_A \right) + \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \psi_A \right) \right]. \quad (2.95)$$

Faremos um processo análogo para as outras componentes da função de onda, temos:

$$\frac{\partial \psi_B}{\partial t} = -v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_A}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_A}{\partial y} \right) - \frac{iV_0}{\hbar} \psi_B - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_C}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_C}{\partial y} \right), \quad (2.96)$$

com seu complexo conjugado dado por:

$$\frac{\partial \psi_B^*}{\partial t} = -v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_A^*}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_A^*}{\partial y} \right) - \frac{iV_0}{\hbar} \psi_B^* - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_C^*}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_C^*}{\partial y} \right), \quad (2.97)$$

resultando em

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_B^*}{\partial t} \psi_B + \psi_B^* \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = & -v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_A^*}{\partial x} \psi_B - i \frac{\partial \psi_A^*}{\partial y} \psi_B \right) + \frac{iV_0}{\hbar} |\psi_B|^2 \\
& -v_F \cos \varphi \left(\frac{\partial \psi_A}{\partial x} \psi_B^* + i \frac{\partial \psi_A}{\partial y} \psi_B^* \right) - \frac{iV_0}{\hbar} |\psi_B|^2 \\
& -v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_C^*}{\partial x} \psi_B + i \frac{\partial \psi_C^*}{\partial y} \psi_B \right) - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_C}{\partial x} \psi_B^* - i \frac{\partial \psi_C}{\partial y} \psi_B^* \right).
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Simplificando, obtemos que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_B^*}{\partial t} \psi_B + \psi_B^* \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = & -2v_F \cos \varphi \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi_A^*}{\partial x} \psi_B \right) + \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi_A^*}{\partial y} \psi_B \right) \right] \\
& -2v_F \sin \varphi \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi_C}{\partial x} \psi_B^* \right) + \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi_C}{\partial y} \psi_B^* \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.99}$$

Finalmente, para a componente ψ_C , temos:

$$\frac{\partial \psi_C}{\partial t} = -\frac{iV_0}{\hbar} \psi_C - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_B}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \right), \tag{2.100}$$

e seu complexo conjugado

$$\frac{\partial \psi_C^*}{\partial t} = \frac{iV_0}{\hbar} \psi_C^* - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \right), \tag{2.101}$$

tal que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_C^*}{\partial t} \psi_C + \psi_C^* \frac{\partial \psi_C}{\partial t} = & -\frac{iV_0}{\hbar} |\psi_C|^2 - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} \psi_C - i \frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \psi_C \right) \\
& + \frac{iV_0}{\hbar} |\psi_A|^2 - v_F \sin \varphi \left(\frac{\partial \psi_B}{\partial x} \psi_C^* + i \frac{\partial \psi_B}{\partial y} \psi_C^* \right).
\end{aligned} \tag{2.102}$$

Simplificando, obtém-se que:

$$\frac{\partial \psi_C^*}{\partial t} \psi_C + \psi_C^* \frac{\partial \psi_C}{\partial t} = -2v_F \sin \varphi \left[2 \operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial x} \psi_C \right) + \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi_B^*}{\partial y} \psi_C \right) \right]. \tag{2.103}$$

Usando as Eqs. (2.95), (2.99) e (2.103), chegamos na expressão

$$\begin{aligned}
\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = & -2v_F \left[\cos \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} \operatorname{Re} (\psi_A^* \psi_B) + \frac{\partial}{\partial y} \operatorname{Im} (\psi_A^* \psi_B) \right) \right. \\
& \left. + \sin \varphi \left(\frac{\partial}{\partial x} \operatorname{Re} (\psi_B^* \psi_C) + \frac{\partial}{\partial y} \operatorname{Im} (\psi_B^* \psi_C) \right) \right].
\end{aligned} \tag{2.104}$$

Como v_F e φ são independentes das coordenadas espaciais, podemos reescrever a Eq. (2.104) na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x} \left(2v_F [\cos \varphi \operatorname{Re}(\psi_A^* \psi_B) + \sin \varphi \operatorname{Re}(\psi_B^* \psi_C)] \right) \\ & -\frac{\partial}{\partial y} \left(2v_F [\cos \varphi \operatorname{Im}(\psi_A^* \psi_B) + \sin \varphi \operatorname{Im}(\psi_B^* \psi_C)] \right). \end{aligned} \quad (2.105)$$

Definindo

$$j_x = 2v_F [\cos \varphi \operatorname{Re}(\psi_A^* \psi_B) + \sin \varphi \operatorname{Re}(\psi_B^* \psi_C)], \quad (2.106)$$

$$j_y = 2v_F [\cos \varphi \operatorname{Im}(\psi_A^* \psi_B) + \sin \varphi \operatorname{Im}(\psi_B^* \psi_C)], \quad (2.107)$$

$$j_x = 2v_F \operatorname{Re}[\psi_B^* (\cos \varphi \psi_A + \sin \varphi \psi_C)], \quad (2.108)$$

e

$$j_y = -2v_F \operatorname{Im}[\psi_B^* (\cos \varphi \psi_A - \sin \varphi \psi_C)]. \quad (2.109)$$

chegamos em

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial J_y}{\partial y} = -\nabla \cdot \mathbf{j}. \quad (2.110)$$

Em síntese, para o cálculo da corrente de probabilidade para os dois casos limites do grafeno e da rede de dados, encontramos para a densidade de probabilidade a seguinte expressão:

$$\mathbf{j} = \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} = 2v_F \begin{pmatrix} \operatorname{Re}[\psi_B^* (\cos \varphi \psi_A + \sin \varphi \psi_C)] \\ -\operatorname{Im}[\psi_B^* (\cos \varphi \psi_A - \sin \varphi \psi_C)] \end{pmatrix}. \quad (2.111)$$

3 TRANSMISSÃO ELETRÔNICA ATRAVÉS DE UMA BARREIRA DE POTENCIAL RETANGULAR

Nesta seção, discutiremos o tunelamento através de uma barreira simples de potencial de tamanho finito d , assim como representado na Figura 6.

3.1 Barreira simples de potencial

O hamiltoniano é dado pela Eq. (2.71) com potencial descrito por

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & 0 \leq x \leq d \\ 0, & x > d \end{cases} \quad (3.1)$$

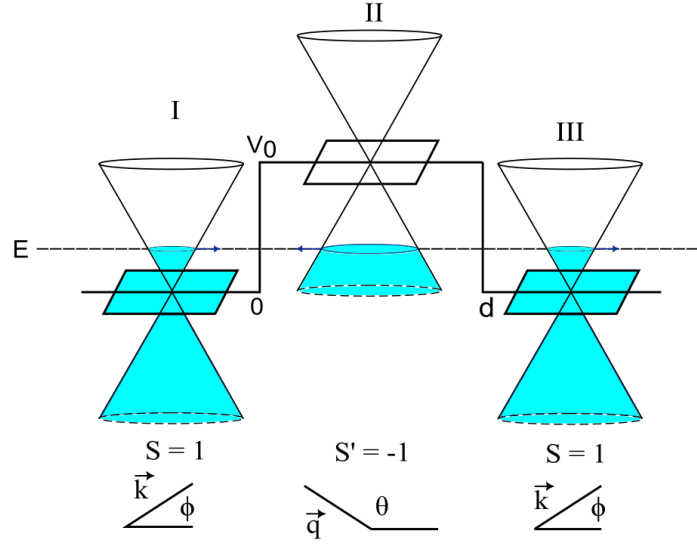


Figura 6: Esquema para tunelamento através de uma barreira de potencial que começa em $x = 0$ e possui altura V_0 e largura d . O círculo azul representa o nível de Fermi e a seta azul indica a direção do vetor de onda. Escolhemos $0 < E < V_0$ e $s = 1$ e $s' = -1$ resultando em um salto np . Os ângulos associados com os vetores de onda estão em baixo da figura para cada região.

como evidenciado pela Figura 6. A seguir, escreveremos as funções de onda Ψ_I , Ψ_{II} e Ψ_{III} para as três regiões, antes da barreira, dentro da barreira e após a barreira, respectivamente.

Na região I (antes da barreira), que contém a onda incidente e refletida, temos a função de onda descrita por:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos \varphi e^{i\phi} \\ s \\ \sin \varphi e^{-i\phi} \end{bmatrix} e^{ik_x x} e^{ik_y y} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -\cos \varphi e^{-i\phi} \\ s \\ -\sin \varphi e^{i\phi} \end{bmatrix} e^{-ik_x x} e^{ik_y y}, \quad (3.2)$$

onde r é a amplitude da onda refletida e, além disso, usamos $\phi_r = \pi - \phi$ para a onda refletida, resultando em $e^{i\phi_r} = -e^{-i\phi}$.

Na região II (dentro da barreira), temos:

$$|\psi_{II}\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos \varphi e^{i\theta} \\ s' \\ \sin \varphi e^{-i\theta} \end{bmatrix} e^{iq_x x} e^{ik_y y} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -\cos \varphi e^{-i\theta} \\ s' \\ -\sin \varphi e^{i\theta} \end{bmatrix} e^{-iq_x x} e^{ik_y y}, \quad (3.3)$$

onde temos duas ondas viajando em direções opostas com amplitudes a e b . O ângulo θ é dado por $\tan \theta = \frac{q_y}{q_x}$ e a conservação do momento na direção $\hat{y}$ nos dá $q_y = k_y$. Além disso, podemos relacionar o ângulo θ com o ângulo de incidência ϕ usando a conservação

do momento na direção y, de modo que obtemos a relação abaixo:

$$\sin \theta = \frac{E}{|E - V_0|} \sin \phi, \quad (3.4)$$

usando $k_y = E \sin \phi$ para a região I e $k_y = |E - V_0| \sin \theta$ para a região II.

Finalmente, na região III (após a barreira), temos

$$|\psi_{\text{III}}\rangle = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos \varphi e^{i\phi} \\ S \\ \sin \varphi e^{-i\phi} \end{bmatrix} e^{ik_x x} e^{ik_y y}, \quad (3.5)$$

com amplitude t .

Posteriormente, aplicaremos as condições de contorno, Eqs. (2.85) e (2.86), nas descontinuidades da barreira em $x = 0$ e $x = d$. Inicialmente, aplicaremos ambas as equações em $x = 0$, de modo que:

$$\psi_{BI}(0) = \psi_{BII}(0). \quad (3.6)$$

Portanto,

$$s + rs = as' + bs' \quad (3.7)$$

chegando em

$$1 + r = ss'(a + b) \quad (3.8)$$

Em seguida, aplicando a Eq. (2.86) em $x = 0$, temos:

$$\cos \varphi \psi_A(0) + \sin \varphi \psi_C(0) = \cos \varphi \psi_A(0) + \sin \varphi \psi_C(0). \quad (3.9)$$

Resultando em:

$$\begin{aligned} & \cos \varphi \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{i\phi} e^{ik_y y} - \frac{r}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{-i\phi} e^{ik_y y} \right) + \\ & \sin \varphi \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \varphi e^{-i\phi} e^{ik_y y} - \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \varphi e^{i\phi} e^{ik_y y} \right) = \\ & \cos \varphi \left(\frac{a}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{i\theta} e^{ik_y y} - \frac{b}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{-i\theta} e^{ik_y y} \right) + \\ & \sin \varphi \left(\frac{a}{\sqrt{2}} \sin \varphi e^{-i\theta} e^{ik_y y} - \frac{b}{\sqrt{2}} \sin \varphi e^{i\theta} e^{ik_y y} \right). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Simplificando, chegamos em

$$\begin{aligned} & \cos^2 \varphi e^{i\theta} + \sin^2 \varphi e^{-i\theta} - r (\sin^2 \varphi e^{i\theta} + \cos^2 \varphi e^{-i\theta}) = \\ & a (\cos^2 \varphi e^{i\theta} + \sin^2 \varphi e^{-i\theta}) - b (\sin^2 \varphi e^{i\theta} + \cos^2 \varphi e^{-i\theta}) \end{aligned} \quad (3.11)$$

e definindo $A(x) = \cos^2 \varphi e^{ix} + \sin^2 \varphi e^{-ix}$ e $B(x) = \cos^2 \varphi e^{-ix} + \sin^2 \varphi e^{ix}$, temos:

$$A(\phi) - rB(\phi) = aA(\theta) - bB(\theta). \quad (3.12)$$

Agora, vamos aplicar as condições de contorno em $x = d$. Assim, temos

$$\psi_{BII}(d) = \psi_{BIII}(d). \quad (3.13)$$

Resultando em:

$$\frac{a}{\sqrt{2}} s' e^{iq_x d} e^{ik_y y} + \frac{b}{\sqrt{2}} s' e^{-iq_x d} e^{ik_y y} = \frac{t}{\sqrt{2}} s e^{ik_x d} e^{1xy}. \quad (3.14)$$

Simplificando, chegamos em

$$s' e^{iq_x d} + b s' e^{-iq_x d} = t s e^{ik_x d}. \quad (3.15)$$

Por fim, aplicando a Eq. (2.86) em $x = d$, temos

$$\cos \varphi \psi_{AI I} (0) + \sin \varphi \psi_{III} (0) = \cos \varphi \psi_A(0) + \sin \varphi \psi_{III} (0). \quad (3.16)$$

Resultando em:

$$\begin{aligned} & \cos \varphi \left(\frac{a}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{i\theta} e^{1q_x d} e^{ik_y y} - \frac{b}{\sqrt{2}} \cos \varphi e^{-i\theta} e^{-iq_x d} e^{ik_y y} \right) + \\ & \sin \varphi \left(\frac{a}{\sqrt{2}} \sin \varphi e^{-i\theta} e^{iq_x d} e^{ik_y y} - \frac{b}{\sqrt{y}} \sin \varphi e^{i\theta} e^{-iq_x d} e^{ik_y y} \right) = \\ & \cos^2 \varphi \frac{t}{\sqrt{2}} e^{i\phi} e^{ik_x d} e^{ik_y y} + \frac{t}{\sqrt{2}} \sin^2 \varphi e^{ik_x d} e^{ik_y y}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Simplificando, chegamos em:

$$\begin{aligned} & a e^{iq_x d} (\cos^2 \varphi e^{i\theta} + \sin^2 \varphi e^{-i\theta}) - b e^{-iq_x d} (\cos^2 \varphi e^{-i\theta} + \sin^2 \varphi e^{i\theta}) = \\ & t e^{ik_x d} (\cos^2 \varphi e^{i\phi} + \sin^2 \varphi e^{-i\phi}). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Das definições de $A(x)$ e $B(x)$, temos que:

$$aA(\theta) e^{iq_x d} - bB(\theta) e^{-iq_x d} = tA(\phi) e^{ik_x d}. \quad (3.19)$$

Em síntese, obtemos o conjunto de equações a partir das condições de contorno dadas por

$$1 + r = s s' (a + b), \quad (3.20)$$

$$A(\phi) - rB(\phi) = aA(\theta) - bB(\theta), \quad (3.21)$$

$$s'e^{iq_x d} + bs'e^{-iq_x d} = tse^{ik_x d}, \quad (3.22)$$

e

$$aA(\theta)e^{iq_x d} - bB(\theta)e^{-iq_x d} = tA(\phi)e^{ik_x d}. \quad (3.23)$$

Nesse trabalho, estamos interessados apenas na solução para t . A priori, encontraremos a expressão para a usando as Eqs. (3.20) e (3.21), assim:

$$1 - ss'(a + b) = -\frac{A(\phi)}{B(\phi)} + a\frac{A(\theta)}{B(\phi)} - b\frac{B(\theta)}{B(\phi)}. \quad (3.24)$$

Isolando a :

$$a \left(ss' + \frac{A(\theta)}{B(\phi)} \right) = 1 - b \left(ss' - \frac{B(\theta)}{B(\phi)} \right) + \frac{A(\phi)}{B(\phi)}, \quad (3.25)$$

chegamos em:

$$a = \left[1 + \frac{A(\phi)}{B(\phi)} - b \left(ss' - \frac{B(\theta)}{B(\phi)} \right) \right] \left[ss' + \frac{A(\theta)}{B(\phi)} \right]^{-1}. \quad (3.26)$$

Para b , temos:

$$b = - \left(1 + \frac{A(\phi)}{B(\phi)} \right) \left(ss' - \frac{A(\theta)}{A(\phi)} \right) D^{-1}, \quad (3.27)$$

com

$$D = \frac{e^{-2iq_x x_0}}{A(\phi)B(\phi)} \left(ss' + \frac{B(\theta)}{A(\phi)} \right) \left(ss' + \frac{A(\theta)}{B(\phi)} \right) - \left(ss' - \frac{B(\theta)}{B(\phi)} \right) \left(ss' - \frac{A(\theta)}{A(\phi)} \right). \quad (3.28)$$

Podemos agora reescrever a como:

$$a = e^{-2iq_x x_0} \left(1 + \frac{A(\phi)}{B(\phi)} \right) \left(ss' + \frac{B(\theta)}{A(\phi)} \right) D^{-1} \quad (3.29)$$

sendo t

$$t = \left(ae^{iq_x x_0} \frac{A(\theta)}{A(\phi)} - be^{-iq_x x_0} \frac{B(\theta)}{A(\phi)} \right) e^{-ik_x x_0}. \quad (3.30)$$

Substituindo a e b na equação acima e realizando algumas manipulações algébricas, chegamos na seguinte relação para t

$$t = \frac{4ss'e^{-id(q_x + k_x)} \cos \theta \cos \phi}{e^{-2iq_x d} f_+ - f_-}, \quad (3.31)$$

onde

$$f_{\pm} = 2 \pm 2ss' \cos(\theta \pm \phi) - \sin^2 2\varphi (s \sin \theta - s' \sin \phi)^2. \quad (3.32)$$

e $|t|^2$ sendo escrito como:

$$|t|^2 = \frac{16 \cos^2 \theta \cos^2 \phi}{f_+^2 + f_-^2 - 2f_+f_- \cos(2q_x x_0)}. \quad (3.33)$$

Para determinar a expressão do coeficiente de transmissão, usaremos a corrente de probabilidade. Foi provado que:

$$j_x = 2v_F \text{Re}[\psi_B^* (\cos \varphi \psi_A + \sin \varphi \psi_C)]. \quad (3.34)$$

Então, para a corrente na região I, temos:

$$j_x^I = 2v_F \text{Re} \left[\frac{s}{\sqrt{2}} e^{-ik_y y} (e^{-ik_x x} + r^* e^{ik_x x}) \times \left(\frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{2}} e^{ik_y y} (e^{i\phi} e^{ik_x x} - r e^{-i\phi} e^{-ik_x x}) + \frac{\sin^2 \varphi}{\sqrt{2}} e^{ik_y y} (e^{-i\phi} e^{-ik_x x} - r e^{i\phi} e^{-ik_x x}) \right) \right]. \quad (3.35)$$

Expandindo a expressão de j_x^I , temos que:

$$\begin{aligned} j_x^I = v_F s \text{Re} \{ & \cos^2 \varphi (e^{i\phi} - r e^{-i\phi} e^{-2ik_x x}) \\ & + \sin^2 \varphi (e^{-i\phi} - r e^{i\phi} e^{-2ik_x x}) \\ & + \cos^2 \varphi (r^* e^{i\phi} e^{2ik_x x} - |r|^2 e^{-i\phi}) \\ & + \sin^2 \varphi (r^* e^{-i\phi} e^{2ik_x x} - |r|^2 e^{i\phi}) \}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

e rearranjando os termos, obtemos

$$\begin{aligned} j_x^I = v_F s \text{Re} \{ & \cos^2 \varphi (e^{i\phi} - r e^{-i\phi} e^{-2ik_x x} - e^{-i\phi} + r e^{i\phi} e^{-2ik_x x}) \\ & + e^{-i\phi} - r e^{i\phi} e^{-2ik_x x} \\ & + \cos^2 \varphi (r^* e^{i\phi} e^{2ik_x x} - |r|^2 e^{-i\phi} - r^* e^{-i\phi} e^{2ik_x x} + |r|^2 e^{i\phi}) \\ & + r^* e^{-i\phi} e^{2ik_x x} - |r|^2 e^{i\phi} \}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

chegando na expressão

$$\begin{aligned} j_x^I = v_F s \text{Re} \{ & 2i \sin \phi \cos^2 \varphi + 2i \sin \phi e^{-2ik_x x} \cos^2 \varphi r \\ & + 2i \sin \phi e^{2ik_x x} \cos^2 \varphi r^* + 2i |r|^2 \sin \phi \cos^2 \varphi \\ & + 2i \text{Im} [e^{i(2k_x x - \phi)} r^*] + e^{-i\phi} - |r|^2 e^{i\phi} \}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Como estamos interessados na parte real da expressão, iremos descartar os termos que são imaginários puros, de modo que:

$$j_x^I = v_F s \operatorname{Re} \left\{ 2i \sin \phi \cos^2 \varphi 2 \operatorname{Re} (r^* e^{2ik_2 x}) \right. \\ \left. + \cos \phi - i \sin \phi - |r|^2 \cos \phi - |r|^2 i \sin \phi \right\}. \quad (3.39)$$

Assim, temos a expressão final para j_x^I :

$$j_x^I = v_F s \cos \phi (1 - |r|^2). \quad (3.40)$$

A corrente j_x^I é a diferença entre dois termos, o primeiro corresponde à corrente incidente e o segundo à corrente refletida. Por fim, para a região III, temos:

$$j_x^{III} = 2v_F \operatorname{Re} \left\{ \psi_{BIII}^* (\cos \varphi \psi_{AIII} + \sin \varphi \psi_{CIII}) \right\}. \quad (3.41)$$

Substituindo as expressões correspondentes às componentes, temos

$$j_x^{III} = 2v_F \operatorname{Re} \left\{ \frac{t^*}{\sqrt{2}} s e^{-iq_x x} e^{-ik_y y} \left(\frac{t}{\sqrt{2}} \cos^2 \varphi e^{i\phi} e^{iq_x x} e^{ik_y y} + \frac{t}{\sqrt{2}} \sin^2 \varphi e^{-i\phi} e^{iq_x x} e^{ik_y y} \right) \right\}. \quad (3.42)$$

Simplificando, obtemos:

$$j_x^{III} = v_F s \operatorname{Re} \left\{ \cos^2 \varphi |t|^2 e^{i\phi} + \sin^2 \varphi |t|^2 e^{-i\phi} \right\}. \quad (3.43)$$

Calculando a parte real, tem-se que:

$$j_x^{III} = v_F s |t|^2 (\cos^2 \varphi \cos \phi + \sin^2 \varphi \cos \phi), \quad (3.44)$$

chegando na expressão

$$j_x^{III} = v_F s \cos \phi |t|^2, \quad (3.45)$$

sendo a corrente na região III, correspondente à corrente transmitida.

O coeficiente de transmissão T é definido como a razão entre a corrente transmitida e a corrente incidente. Logo:

$$T = \frac{v_F s \cos \phi}{v_F s \cos \phi} |t|^2. \quad (3.46)$$

Simplificando:

$$T = |t|^2. \quad (3.47)$$

Desse modo, temos para o coeficiente de transmissão a seguinte equação

$$T = \frac{16 \cos^2 \theta \cos^2 \phi}{f_+^2 + f_-^2 - 2f_+f_- \cos(2q_x d)}. \quad (3.48)$$

A Eq. (3.48) se reduz à probabilidade de transmissão do grafeno [35] e da rede de dados [36] via substituição de $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$, respectivamente.

A seguir, faremos uma análise detalhada da transmissão com relação ao parâmetro α .

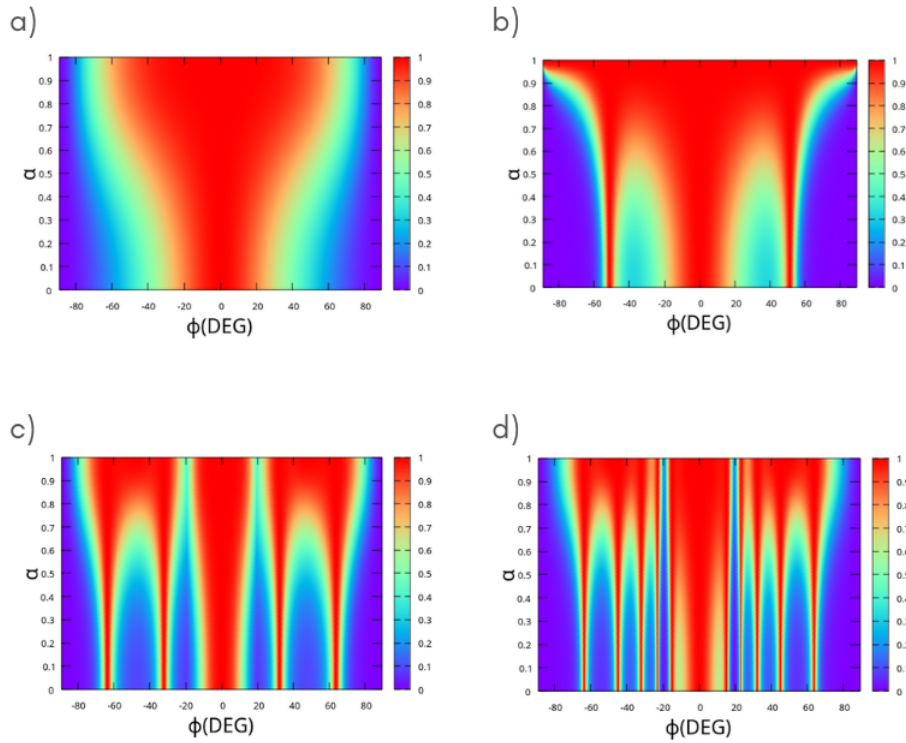


Figura 7: Mapa de densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência ϕ (em graus) e do parâmetro α , para diferentes razões E/V_0 : (a) $E/V_0 = 0,25$, (b) $E/V_0 = 0,5$, (c) $E/V_0 = 0,75$ e (d) $E/V_0 = 1,5$. Os resultados foram obtidos considerando uma barreira de largura $d = 30$ nm e altura $V_0 = 0,2$ eV.

Na Figura 7, é mostrada a densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência e do parâmetro α para alguns valores de energia. Na Figura 7(a), nota-se o tunelamento Klein para $\phi = 0$ e um aumento de valores cuja transmissão é perfeita ($T = 1$) ao aumentar α . Em (b) é possível observar o tunelamento Super Klein previsto para a rede de dados ($\alpha = 1$), isto é, transmissão perfeita para todos os ângulos de incidência cuja energia é igual a metade da altura da barreira. Em (c) e (d), nota-se o

tunelamento Klein para $\phi = 0$ e, além disso, o aumento de picos de ressonância em $T = 1$ quando a energia é aumentada. De modo geral, para $\frac{E}{V_0} < 0,5$ há um único máximo de transmissão e para valores $\frac{E}{V_0} > 0,5$ há mais valores cujo pico de ressonância se localiza em $T = 1$.

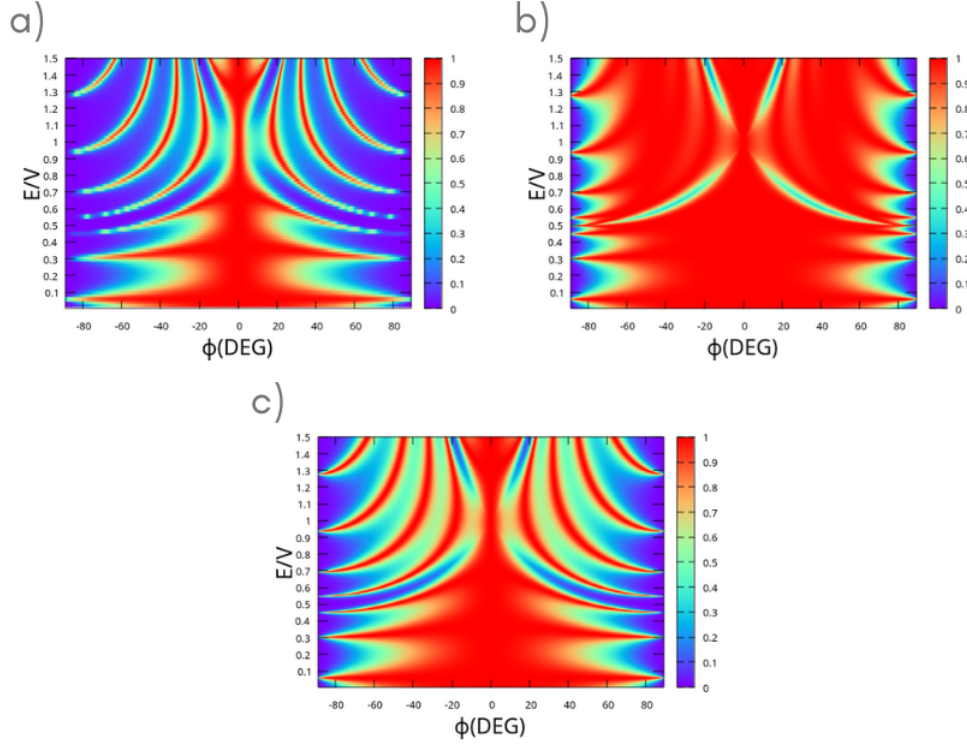


Figura 8: Mapas de densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência ϕ (em graus) e da razão E/V_0 , para diferentes valores do parâmetro α e do ângulo φ : (a) $\alpha = 0$, (b) $\alpha = 1$ e (c) $\varphi = \pi/6$. Os resultados foram obtidos considerando uma barreira de largura $d = 30$ nm e altura $V_0 = 0,2$ eV.

Na Figura 8, estão sendo representados mapas de densidade do coeficiente de transmissão em função do ângulo de incidência e da razão E/V_0 para alguns valores de α . Na Figura 8(a), é possível notar o tunelamento Klein para $\phi = 0$ no grafeno ($\alpha = 1$). Em (b), a rede de dados mostra uma longa faixa de valores cuja transmissão é perfeita, em especial o caso de $E/V_0 = 0,5$ onde nota-se o tunelamento super Klein. Finalmente, em (c) é analisado o caso intermediário de α e quando comparado com o grafeno, vê-se certa semelhança, com um aumento de valores cuja transmissão é perfeita para o caso intermediário e, além disso, cabe destacar possíveis faixas de transmissão perfeita para todos os valores de ϕ , isto é, tunelamento super Klein, para valores de E/V_0 próximos a 0, 1 e 3.

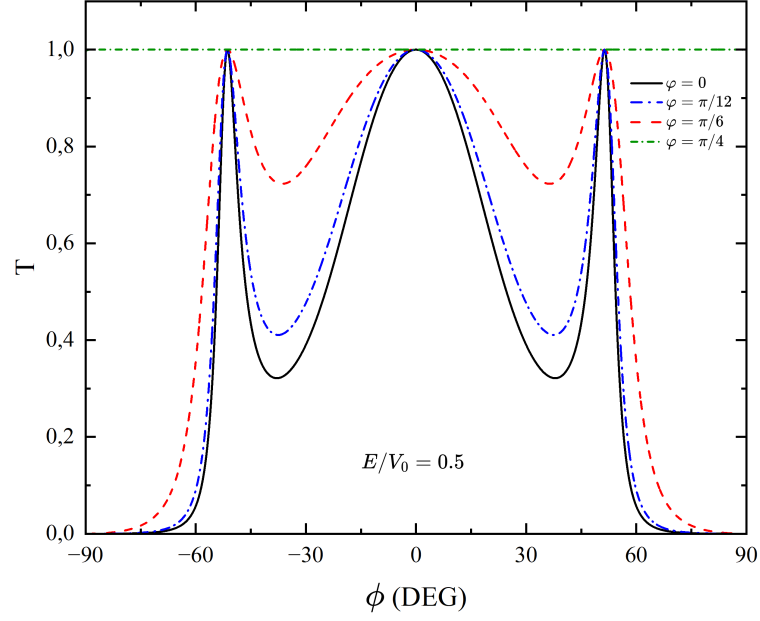


Figura 9: Probabilidade de transmissão em coordenadas polares para uma faixa de valores de α com $E/V_0 = 0.5$.

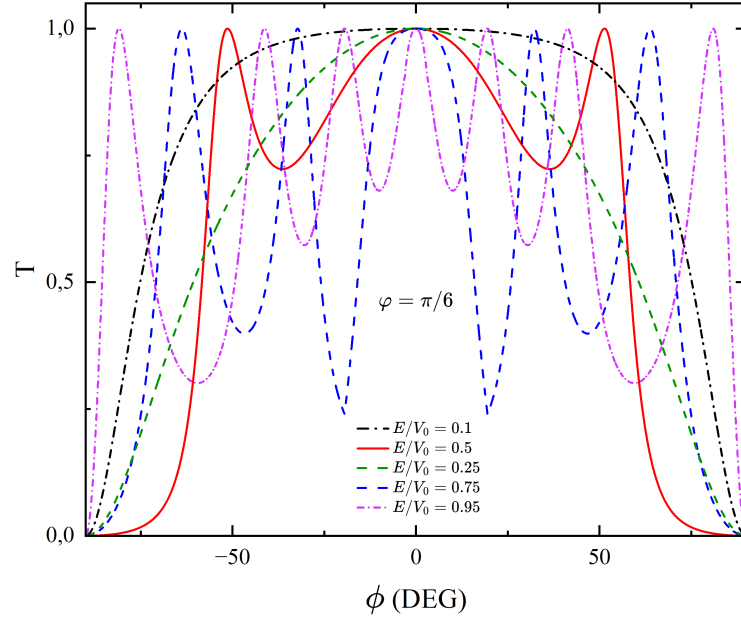


Figura 10: Probabilidade de transmissão em coordenadas polares para $\alpha \approx 0.58$ para as razões $E/V_0 = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75$ e 0.95 .

Para incidência normal, ou seja, $\phi = 0$, temos $T = 1$ para todos os valores de α considerados, assim como mostrado na Figura 9. Isso implica em uma transmissão completa para um elétron que incide perpendicularmente na barreira. Além disso, foi

observado um tunelamento super Klein para elétrons com energia equivalente a metade da altura da barreira para $\varphi = \pi/4$ (rede de dados). Em geral, observamos transmissão aprimorada quando α aumenta. Quanto mais α aumenta de 0 a 1, mais os picos de ressonância se tornam mais suaves e menos “pontiagudos”. Essa redução dos picos de ressonância resulta em um aumento nos ângulos de transmissão para os ângulos que estão próximos desses picos, contribuindo para a regra geral de aumento da transmissão para valores maiores de α . Isso pode ser visto facilmente na figura 9, onde os picos da ressonância se transformam em uma transmissão completa $T(\phi) = 1$ no caso limite para $\alpha = 1$ (rede de dados).

A probabilidade de transmissão para alguns valores da razão E/V_0 e para o valor intermediário de α equivalente à $\alpha \approx 0.58$, estão sendo mostradas na Figura 10. Para E/V_0 menor que $E/V_0 = 0.5$, observamos um único máximo de transmissão de $T=1$ para $\phi = 0$. Quanto mais a energia aumenta com relação à altura da barreira, a função de onda é capaz de sofrer interferência com ela mesma dentro da barreira, resultando em ressonâncias marcadas por máximos de $T = 1$.

4 CONCLUSÕES

Neste trabalho, estudamos a transmissão eletrônica na rede $\alpha - T_3$ através de uma barreira simples de potencial. No Capítulo 2, abordamos as propriedades eletrônicas fundamentais da rede $\alpha - T_3$. Partimos do hamiltoniano *tight-binding* [33] e calculamos a dispersão de energia para essa rede. Em seguida, expandimos em torno dos pontos de Dirac nos vales K e K', obtendo a forma do hamiltoniano em baixas energias. Posteriormente, encontramos as funções de onda e determinamos a corrente de probabilidade para os dois casos limites. No Capítulo 3, calculamos o coeficiente de transmissão para uma barreira simples de potencial e realizamos um estudo sobre a influência do parâmetro α nesse coeficiente.

Para a barreira de potencial, o coeficiente de transmissão é dado pela equação (3.48). Observamos que para incidência normal ($\phi = 0$), ocorre o tunelamento Klein com transmissão perfeita ($T = 1$) independentemente da energia ou do valor de α . No regime intermediário ($\alpha = 0,5$), para $E/V_0 < 0,5$, a transmissão perfeita só ocorre para incidência normal, enquanto para energias maiores surgem ressonâncias associadas à interferência da função de onda dentro da barreira, caracterizadas por máximos em $T = 1$. De modo geral, a transmissão melhora com o aumento de α . À medida que α varia de 0 a 1, os picos de ressonância se tornam mais suaves e largos, ampliando a faixa angular de transmissão perfeita — como ilustrado na figura 9, onde esses picos culminam em transmissão completa no limite $\alpha = 1$ (rede de dados). Além disso, observamos a possibilidade de tunelamento super Klein para α intermediário, próximo aos valores de E/V_0 próximos a 0,1 e 0,3 evidenciado na Figura 8(c).

Além da análise realizada para barreiras eletrostáticas no modelo $\alpha - T_3$, tínhamos a intenção de estender esse estudo para o caso de barreiras magnéticas e, em seguida, fazer uma comparação direta entre os dois tipos de potenciais e seus efeitos sobre o coeficiente de transmissão. Tal estudo seria de extrema importância para explorar as características das quasipartículas do modelo $\alpha - T_3$ sob diferentes condições de confinamento. Portanto, fica a sugestão para trabalhos futuros, visando uma compreensão mais completa dos mecanismos de tunelamento e transporte eletrônico nesse sistema.

REFERÊNCIAS

- [1] DEUTSCH, David. Quantum theory, the Church–Turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v. 400, p. 97–117, 1985.
- [2] DIENY, B. et al. Spin-valve effect in soft ferromagnetic sandwiches. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 93, p. 101–104, 1991.
- [3] FERT, A.; GRÜNBURG, P. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Superlattices. **Physical Review Letters**, v. 61, p. 2971–2974, 1988.
- [4] DAS SARMA, S.; FABIAN, J.; HU, X.; ZUTIC, I. Spintronics: electron spin coherence, entanglement, and transport. **Superlattices and Microstructures**, v. 27, p. 289–295, 2000.
- [5] ARDAVAN, A.; BRIGGS, G. A. D. Quantum control in spintronics. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 369, p. 3229–3248, 2011.
- [6] BURKARD, G.; ENGEL, H. A.; LOSS, D. **Spintronics and quantum dots for quantum computing and quantum communication**. [S. l.]: arXiv, 2000.
- [7] FLATTÉ, M. E. Semiconductor spintronics for quantum computation. In: FLATTÉ, M. E.; TIFREA, I. (Ed.). **Manipulating Quantum Coherence in Solid State Systems**. Dordrecht: Springer, 2007. p. 1–14.
- [8] GERSON, C. O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 3, p. 1–8, 2011.
- [9] SANTOS, Jesebel Costa et al. Spintrônica: uma revisão. **Revista Naval e Oceânica**, Rio de Janeiro, v. 1, p. 77–83, 2024.
- [10] ASLAM, Nabeel et al. Quantum sensors for biomedical applications. **Nature Reviews Physics**, v. 5, n. 3, p. 157–169, 2023.
- [11] BERNEVIG, B. Andrei; FELSER, Claudia; BEIDENKOPF, Haim. **Progress and prospects in magnetic topological materials**. [S. l.]: arXiv, 2022.
- [12] HODDESON, Lillian et al. (Ed.). **Out of the crystal maze: chapters from the history of solid state physics**. Oxford: Oxford University Press, 1992.
- [13] AMADEO, Marcello. A École Polytechnique de Paris: mitos, fontes e fatos. **Boletim de Educação Matemática (BOLEMA)**, v. 26, n. 44, p. 1–20, 2012.

- [14] RICKHAUS, Peter; WEISS, Markus; MAROT, Laurent; SCHÖNENBERGER, Christian. Quantum Hall effect in graphene with superconducting electrodes. **Nano Letters**, v. 12, n. 4, p. 1942–1945, 2012.
- [15] LI, Si-Yu; HE, Lin. Recent progresses of quantum confinement in graphene quantum dots. **Frontiers of Physics**, v. 17, n. 3, p. 1–16, 2022.
- [16] **EXPLORING quantum materials and applications: a review. Journal of Materials Science: Materials in Electronics**, v. 35, 2024.
- [17] ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, N. David. **Solid state physics**. [S. l.]: Cengage Learning, 2022.
- [18] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- [19] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional atomic crystals. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 102, n. 30, p. 10451–10453, 2005.
- [20] GUPTA, A.; SAKTHIVEL, T.; SEAL, S. Recent development in 2D materials beyond graphene. **Progress in Materials Science**, v. 73, p. 44–126, 2015.
- [21] MAS-BALLESTE, R. et al. 2D materials: to graphene and beyond. **Nanoscale**, v. 3, [número], p. [páginas], 2011.
- [22] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. **Nature**, v. 438, p. 197–200, 2005.
- [23] YOUNG, A.; KIM, P. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. **Nature Physics**, v. 5, p. 222–226, 2009.
- [24] MAKSIMOVA, G. M.; DEMIKHOVSKII, V. Ya.; FROLOVA, E. V. Wave packet dynamics in a monolayer graphene. **Physical Review B**, v. 78, p. 235321, 2008.
- [25] GRIFFITHS, David J. **Introduction to Quantum Mechanics**. 2. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall, 2005.
- [26] YOUNG, A.; KIM, P. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. **Nature Physics**, v. 5, p. 222–226, 2009.
- [27] URBAN, D. F. et al. Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles. **Physical Review B**, v. 84, p. 115136, 2011.
- [28] RAOUX, A. et al. From Dia- to Paramagnetic Orbital Susceptibility of Massless Fermions. **Physical Review Letters**, v. 112, p. 026402, 2014.

- [29] BERCIOUX, D. et al. Massless Dirac-Weyl fermions in T_3 optical lattice. **Physical Review A**, v. 80, p. 063603, 2009.
- [30] MCCLURE, J. W. Diamagnetism of graphite. **Physical Review**, v. 104, p. 666–671, 1956.
- [31] SUTHERLAND, Bill. Localization of electronic wave functions due to local topology. **Physical Review B**, v. 34, p. 5208–5211, 1986.
- [32] VIDAL, Julien; MOSSERI, Rémy; DOUÇOT, Benoit. Aharonov-Bohm cages in two-dimensional structures. **Physical Review Letters**, v. 81, p. 5888–5891, 1998.
- [33] ILLES, Emilia. **Properties of the α - T_3 Model**. 2017. Tese (Doutorado em Física) – University of Guelph, Guelph, 2017.
- [34] ILLES, E.; NICOL, E. J. Klein tunnelling in the α - T_3 model. **Physical Review B**, v. 95, p. 235432, 2017.
- [35] ALLAIN, P. E.; FUCHS, J. N. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons. **The European Physical Journal B**, v. 83, p. 301–317, 2011.
- [36] URBAN, Daniel F. et al. Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles. **Physical Review B**, v. 84, p. 115136, 2011.
- [37] SENA, Sílvia Helena Roberto de. **Propriedades eletrônicas de tricamada de grafeno e nanofitas de carbono tensionadas**. 2012. 163 f. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal do Ceará; Universiteit Antwerpen, Fortaleza, 2012.