ESTUDO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO NO MODELO ALPHA-T3

Maria Emile De Souza Silva[1]
Silvia Helena Roberto De Sena[2]

RESUMO

A geometria de uma rede cristalina influencia no comportamento da estrutura de bandas eletrônicas de um material e, por consequência, em suas propriedades físicas. O isolamento de amostras de grafeno de alta qualidade em 2004 impulsionou a pesquisa na área de materiais bidimensionais, levando à investigação teórica de possíveis cristais projetados com geometrias que resultam 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 $\alpha - T3$. Com esta última podendo variar entre as redes do grafeno($\alpha = 0$) e de dados($\alpha = 1$) através do parâmetro α, permitindo, assim, um estudo teórico que engloba sistemas de pseudospins 1/2 e 1. 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, primeiramente, em um sistema de matéria condensada em amostras de grafeno. Em adição, estudos teóricos mostram que na rede de dados espera-se um tunelamento super Klein, ou seja, para um certo valor 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 0 a 1.

Palavras-chave: Rede $\alpha - T3$; Tunelamento Klein; Coeficiente de transmissão; Super-redes.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), Instituto de Ciências exatas e da Natureza (ICEN), Discente, emilesilva011@gmail.com[1]
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), Instituto de Ciências exatas e da Natureza (ICEN), Docente, silviahelena@unilab.edu.br[2]

INTRODUÇÃO

Inúmeros dispositivos eletrônicos da modernidade surgiram a partir da aplicação de campos externos que são capazes de controlar as propriedades óticas, eletrônicas e magnéticas dos materiais. Dessa forma, juntamente com o interesse em compreender os fenômenos físicos em sistemas de matéria condensada, vem a justificativa da constante busca de novos materiais cujas propriedades possam ser controladas por efeito de campo e utilizadas no desenvolvimento de novos dispositivos cada vez mais avançados. Dentro desse contexto, a produção do grafeno, primeiro cristal bidimensional (2D) isolado experimentalmente [3, 4], desempenhou um papel importante em fomentar uma nova área de pesquisa e impulsionar a busca de novos materiais bidimensionais (2D) [10,11]. O grafeno atraiu grande atenção devido a suas características únicas, sendo o material mais pequeno e forte já medido, além disso, possui um espectro eletrônico cônico no regime de baixas energias, o que permite que sua investigação teórica seja realizada a partir da equação de Dirac para partículas relativísticas de massa zero [12, 13] ,sendo o primeiro sistema de matéria condensada a permitir o estudo de fenômenos de altas energias, tais como tunelamento Klein[2] e zitterbewegung [14].

Nesse contexto, grande atenção vem sendo dada a sistemas similares ao grafeno que apresentam dispersões cônicas, coexistindo com uma banda plana, tais como Lieb, Kagome, dados e $\alpha-T3$. Onde esta última possui uma particularidade interessante, podendo interpolar continuamente entre a rede de grafeno e rede de dados através da mudança do parâmetro α, permitindo, assim, um estudo teórico da transição contínua entre sistemas de pseudospins ½ e 1. A rede $\alpha-T3$ conta com três átomos por célula unitária nos sítios A, B e C. Essa rede pode ser entendida como uma extensão da estrutura favo de mel hexagonal(HCL) do grafeno com um átomo adicional localizado no centro de cada hexágono, no sítio C. Este átomo adicional está acoplado apenas a uma das duas subredes triangulares que compõem a HCL. Logo, para formar a rede $\alpha - T3$, o novo sítio C deve acoplar-se a apenas um dos dois sítios originais da rede do grafeno, onde a interação se dá entre B e C através do termo de hopping αt, no qual α pode variar de zero(rede do grafeno) a um(rede de dados).

Com relação a dispersão de energia da rede $\alpha - T3$., como esperado, existem três bandas, as bandas de valência e condução, similarmente ao grafeno se tocando nos vértices da primeira zona de Brillouin, formando os cones de Dirac para o regime de baixas energias, diferindo-se apenas pela presença de uma banda plana sem dispersão que “separa” os 6 cones de valência e condução, onde cada uma delas possui uma equação que as descreve.

Na mecânica clássica, quando se tem partículas tentando atravessar barreiras de potencial, ou seja, tunelar barreiras, é possível que existam situações na qual a ultrapassagem seja impossível de acontecer. Em contrapartida, na Mecânica Quântica existe um fenômeno chamado tunelamento quântico, que descreve a situação onde partículas conseguem atravessar regiões de potencial classicamente proibidas e, além disso, dada certas circunstâncias a probabilidade de transmissão vai a 100% independente do ângulo de incidência delas. Um efeito ainda mais contra intuitivo é encontrado na descrição de partículas relativísticas. Um exemplo é a transmissão total de partículas relativísticas através de barreiras de potencial para incidência normal, conhecido como tunelamento Klein, tal efeito foi observado pela primeira vez em um sistema de matéria condensada em amostras de grafeno [2]. Em adição, estudos teóricos apontam que na rede de dados espera-se um tunelamento Super Klein [5], ou seja, para um certo valor de energia, a saber, quando o portador tiver uma energia igual a metade da energia da barreira ($E=U/2$), tem-se transmissão total de elétrons para qualquer ângulo de incidência. Dessa forma, o modelo $\alpha - T3$ permite a investigação de como se dá a transição das propriedades de transporte entre estes dois sistemas [6].

METODOLOGIA

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 [6]. Para o caso da rede α-τ3, o salto entre os sítios A e B acontece através do parâmetro ▯, enquanto entre B e C é dado pelo parâmetro αt.

Dessa forma, chegamos ao Hamiltoniano tight-binding, no qual calculamos seus autovalores e, assim, obtemos a informação da dispersão de energia para o modelo α-τ3. A dispersão de energia é idêntica a dispersão de energia das bandas de valência e condução para o grafeno, onde a rede $\alpha - T3$ se difere somente devido a presença de uma banda plana que corta através dos pontos de Dirac, onde as duas bandas se encontram.

Assim como usualmente feito com o grafeno, é possível fazer uma expansão em torno do ponto de Dirac nos vales K e K'. Dessa forma, chegamos na expressão linearizada de f. Assim, podemos reescrever a dispersão de energia em função da versão linearizada de f. Como esperado, há três bandas de energia: uma banda plana e dois cones, sendo um de valência e um de condução.

Em seguida, determinamos as funções de onda da rede α-τ3, através dos autovetores do Hamiltoniano para baixas energias. Logo, chegamos nas equações das funções de onda para a banda plana e para os cones. Agora, escrevendo o Hamiltoniano para baixas energias em torno de um ponto K na zona hexagonal de Brillouin, chegamos na função de onda através dos autovetores do Hamiltoniano. Para determinar a transmissão através de uma barreira de potencial, precisamos encontrar as condições de contorno para as funções de onda nas interfaces da barreira. Dessa forma, para estabelecer a relação entre as funções de onda em cada região, utilizamos a substituição de Peierls (k -> p̂) e integramos a equação de autovalor $\hat{H}\Psi = E\Psi$ sobre um pequeno intervalo $x = [-\varepsilon, \varepsilon]$, permitindo que esse intervalo tenda a zero. Fazendo esse procedimento chegamos nas equações para as condições de contorno para potenciais V(x) não divergentes. Além disso, calculamos a corrente de probabilidade.

Ademais, calculamos o coeficiente de transmissão para o potencial degrau e fizemos um estudo detalhado analisando os casos limites e comentando sobre alguns valores de energia e ângulos de incidência. Por fim, realizamos o mesmo procedimento para a barreira simples de potencial, encontrando o coeficiente de transmissão e analisando os parâmetros que influenciam na sua variação.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao chegar na equação do coeficiente de transmissão para o potencial degrau, observamos que para incidência normal temos transmissão perfeita (T =1) para todos os valores de alpha, ou seja, o potencial fica “invisível” e o elétron consegue ultrapassá-lo independe do valor de sua altura. Quando realizamos uma análise da transmissão para um valor fixo de alpha (alpha =1) para a rede de dados com relação a uma faixa de valores de E\Vo foi possível observar novamente T=1 para incidência normal, como esperado. Para o restante dos ângulos , visualizamos um aumento na probabilidade de transmissão quando essa razão aumenta de 0 para 0.5 e o intervalo de ângulos com transmissão quase perfeita cresce. Além disso, quando a razão E/Vo aumenta de 0.5 a 1 esse intervalo de probabilidade de transmissão diminui, com as curvas se tornando mais “estreitas”.

Para E/Vo= 0.5 verificamos transmissão perfeita para todos os ângulos de incidência, conhecido como tunelamento super Klein, que era um dos objetivos da pesquisa.

Ao realizar uma análise da probabilidade de transmissão para uma faixa de valores de alpha, em E/Vo = 0.5 para alpha =1 temos T =, enquanto para os outros valores de alpha, há a dependência angular no coeficiente de transmissão.

Para a barreira de potencial, chegamos a equação do coeficiente de transmissão. Realizando uma análise detalhada da transmissão com relação ao parâmetro alpha, observamos também que para incidência normal T=1 para todos os valores de alpha. Focando em um regime intermediário de alpha (alpha = 0.5), observamos que para E/Vo menores que E/Vo =0.5 visualizamos apenas um único máximo de transmissão de T = 1 para o ângulo de incidência normal (phi = 0). Quanto mais a energia aumenta com relação a altura da barreira, a função de onda é capaz de sofrer interferência com ela mesma dentro da barreira, aparentando estar em um interferômetro de Fabry-Pérot, resultando em ressonâncias marcadas por máximos em T=1. Em geral, a transmissão é aprimorada quando alpha aumenta, para todos os ângulos onde a transmissão já não é 1. Como notamos anteriormente, a interferência de Fabry-Pérot ocorre para Qyd igual a múltiplos inteiros de pi. Quanto mais alpha aumenta de 0 a 1, mais os picos de ressonância se tornam mais suaves e menos pontiagudos. Essa redução dos picos de ressonância resultam em um aumento na faixa dos ângulos de incidência com transmissão perfeita, onde os picos de ressonância se tornam uma transmissão completa no caso limite de alpha = 1 (rede de dados).

CONCLUSÕES

Analisamos ambos os casos de transmissão através do potencial degrau e barreira de potencial. Foi observado o tunelamento klein, ou seja, transmissão perfeita para elétrons incidentes independente da energia que incidem com ângulo de incidência igual a 90° com relação a barreira, para todos os valores de alpha. Além disso, para o potencial degrau foi verificado o tunelamento super Klein para a rede de dados (alpha = 1), onde ocorre transmissão perfeita para elétrons incidentes, independente do ângulo de incidência, desde que a energia do elétron seja metade da altura do potencial. Para o restante dos casos, geralmente, foi observado um aprimoramento da transmissão com o aumento do parâmetro alpha, com exceção daqueles que já tinham T =1.

Para a barreira de potencial, vimos uma tendência do aprimoramento da transmissão com o aumento do parâmetro alpha. A ressonância de Fabry-Pérot foi encontrada no regime intermediário de alpha, tanto no caso do grafeno (alpha=0) quanto rede de dados (alpha =1). Além disso, vimos que para os picos de ressonância, transmissão perfeita (T=1), T independe de alpha. Ademais, quando alpha aumenta de 0 a 1 observamos que os picos de ressonância se tornam mais suaves, onde essa redução dos picos resultam 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 alpha.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) - Unilab, no qual fui bolsista, por viabilizar o desenvolvimento dessa pesquisa.

A Profa Dra. Silvia Helena Roberto de Sena pela orientação no decorrer do projeto.

A Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (Unilab) por dar a oportunidade de participar de projetos de pesquisa e aquisição de conhecimentos que abrangem além do Projeto Político Pedagógico do curso de licenciatura em Física.

REFERÊNCIAS

[1] Griffiths, D. J. and Schroeter, D. F. Introduction to Quantum Mechanics, Cambridge University Press; 3rd Revised ed., 2018.

[2] Young, A., Kim, P. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. Nature Phys., 5, 222-226, 2009.

[3] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, I.V. and Firsov, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science, 06(5696):666-669, 2004.

[4] Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin, F., Booth, T. J., Khotkevich, V. V., Morozov, S. V. and Geim, A. K. Two-dimensional atomic crystals. Proceedings of the National Academy of Sciences, 102(30):10451-10453, 2005.

[5] Urban, D. F., Bercioux, D., Wimmer, M. and Häusler, W. Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles. Phys. Rev. B, 84: 115136, 2011.

[6] Illes, E., and Nicol, E. J. Klein tunnelling in the $\alpha - T\ 3$ model. Phys. Rev. B, 95: 235432, 2017.

[7] Markoš, P. and Soukoulis, C. M. Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials, Princeton University Press, Princeton, 2008.

[8] Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D., Solid State Physics, Brooks/Cole; 1ª edição, 1976.

[9] Yang, C. H., Wieser, R. and Wang, L. The effect of a variable coupling parameter on the tunneling properties from graphene to $\alpha - T\ 3$ model. J. Appl. Phys., 128: 094301, 2020.

[10] Gupta, A., Sakthivel, T. and Seal, S. Recent development in 2D materials beyond graphene. Progress in Materials Science, 73, 44-126, 2015.

[11] Mas-Balleste, R., Gomez-Navarro, C., Gomez-Herrero, J. and Zamora, F. 2D materials: to graphene and beyond. Nanoscale, 3, 20, 2011.

[12] A. K. Geim, "Graphene: Status and prospects," Science 324, 1530–1534 (2009).

[13] Novoselov, K.S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V., Firsov, A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. Nature, 438: 197-200, 2005.

[14] Maksimova, G. M., Demikhovskii, V. Ya. and Frolova, E. V. Wave packet dynamics in a monolayer graphene. Phys. Rev. B, 78: 235321, 2008. 6.

[15] Cunha, Sofia & Da Costa, Diego & Pereira, Joao & Costa Filho, R. & Van Duppen, Ben & Peeters, F.. (2022). Tunneling properties in $\alpha - T\ 3$ lattices: Effects of symmetry-breaking terms. Physical Review B. 105. 10.1103/PhysRevB.105.165402.

[16] P. E. Allain and J. N. Fuchs, "Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons," The European Physical Journal B 83, 301–317 (2011).

[17] Daniel F. Urban, Dario Bercioux, Michael Wimmer, and Wolfgang H¨ausler, "Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles," Phys. Rev. B 84, 115136 (2011).

[18] Illes, E. Properties of the Alpha - T3 Model. 2017. Thesis (doctor of Philosophy in Physics) - University of Guelph, Ontario, Canada, 2017.

ISSN: 2447-6161