



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS VIA
MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E FUNÇÃO DE GREEN RECURSIVA NO
EQUILÍBRIO**

FORTALEZA

2021

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS VIA MATRIZ
DE TRANSFERÊNCIA E FUNÇÃO DE GREEN RECURSIVA NO EQUILÍBRIO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa

FORTALEZA

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- A31t Albuquerque, Ismael da Graça.
Transporte Eletrônico Em Semicondutores Anisotrópicos Via Matriz de Transferência e Função de Green Recursiva no Equilíbrio / Ismael da Graça Albuquerque. – 2021.
183 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.
Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.
1. Transporte eletrônico. 2. Semicondutores anisotrópicos bidimensionais. 3. Método da matriz transferência. 4. Formalismo da Função de Green no equilíbrio. I. Título.
- CDD 530
-

ISMAEL DA GRAÇA ALBUQUERQUE

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS VIA MATRIZ
DE TRANSFERÊNCIA E FUNÇÃO DE GREEN RECURSIVA NO EQUILÍBRIO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada

Aprovada em: 17 de Setembro de 2021

BANCA EXAMINADORA

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

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

Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.
Universidade Federal do Ceará - UFC

Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

*Dedico esta dissertação a Deus, minha família
e amada esposa.*

AGRADECIMENTOS

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

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

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

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

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

Agradeço especialmente a meu orientador Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa que me guiou com muita paciência e dedicação durante todo esse tempo e tem sido uma pessoa muito importante para o meu crescimento durante o mestrado.

Sou grato a Profa. Dra. Silva Helena, ao Prof. Dr. João Milton, e ao Prof. Dr. André Chaves por aceitarem compor a Banca Examinadora da minha dissertação e pelas valiosas sugestões.

Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

"O importante é não parar de questionar; a curiosidade tem sua própria razão de existir"

(Einstein, 1955)

RESUMO

Desde a década de 1980, foi possível crescer/sintetizar estruturas e dispositivos em que as dimensões são realmente menores do que os comprimentos característicos de interesse. Os fenômenos físicos observados em tais sistemas exibem efeitos quânticos devido ao confinamento de portadores, ao contrário daqueles materiais na versão *bulk*, que podem ser descritos por meio de abordagens semi-clássicas. No contexto das propriedades de transporte, os materiais *bulk* são bem descritos pela equação de transporte de Boltzmann ou aproximação similar à equação cinética, enquanto em dispositivos quânticos um tratamento teórico requer o uso combinado de diferentes técnicas e aproximações, tais como: o formalismo de transmissão, como a Fórmula de Landauer, sondas de Büttiker e método da matriz de espalhamento ou transferência, bem como o formalismo da função de Green. O primeiro é usualmente considerado nas situações em que dissipações são ignoradas e o comprimento da região a ser simulado é consideravelmente menor que os comprimentos de dissipação característicos, tais como o livre caminho médio ou comprimento de relaxação de fase, isto é, como nos casos de transporte balístico. Por outro lado, o último é um método mais conveniente para calcular as propriedades físicas de amostras conectadas a eletrodos, em especial para sistemas com quebra de coerência de fase, tratando de forma mais rigorosa processos físicos que se tornam importantes no transporte quântico, tais como espalhamento devido impurezas e defeitos estruturais. Tendo em vista o grande interesse prático para o desenvolvimento de novas tecnologias e aliado ao fato de novos materiais lamelares se mostrarem bastante promissores no *design* de dispositivos em nanoescala, nesse trabalho investigamos as propriedades de transporte em materiais semicondutores bidimensionais (2D) isotrópicos e anisotrópicos na presença de uma superrede gerada por uma sequência de barreiras de potenciais com perfis retangular e linear. As assinaturas de transporte anisotrópico no que diz respeito ao número de barreiras de potenciais, bem como a altura e largura das barreiras e sua orientação no cristal são analisadas. Para tal, primeiramente apresentamos os conceitos e propriedades físicas básicas relativas ao método da matriz de transferência, utilizando Hamiltonianos dentro da aproximação da massa efetiva, e o formalismo da função de Green no equilíbrio aliado a técnica da equação do movimento. Em adição, discutimos (i) o cálculo da transmissão através de um potencial quântico com perfil arbitrário via matriz de transferência; e (ii) o cálculo da densidade de estados e do coeficiente de transmissão, via o método recursivo da função de Green no equilíbrio, em redes discretas 1D e 2D de elétrons não-interagentes descritos por Hamiltonianos *tight-binding*, exemplificando com os casos da rede de poucos (1, 2 e 3) sítios,

cadeias lineares finita e infinita, e redes 2D (quadrada, grafeno e fosforeno).

Palavras-chave: Transporte eletrônico; Semicondutores anisotrópicos bidimensionais; Método da matriz transferência; Formalismo da Função de Green no equilíbrio.

ABSTRACT

Since the 1980s, it has been possible to grow/synthesize structures and devices where the dimensions are actually smaller than the characteristic lengths of interest. The physical phenomena observed in such systems exhibit quantum effects due to the confinement of carriers, unlike those materials in the bulk version, which can be described using semi-classical approaches. In the transport properties context, bulk materials are well described by Boltzmann transport equation or similar kinetic equation approximation, whereas in quantum devices a theoretical treatment requires the combined use of different techniques and approximations, such as: the transmission formalism, like the Landauer formula, Büttiker probes, and scattering or transfer matrix method, as well as as well as the Green function formalism. The first is usually considered in situations where dissipations are ignored and the length of the region being simulated is considerably smaller than the characteristic dissipation lengths, such as the mean free path or phase relaxation length, that is, as in the cases of ballistic transport. On the other hand, the latter is a more convenient method to calculate the physical properties of samples connected to electrodes, especially for systems with broken phase coherence, dealing more rigorously with physical processes that become important in quantum transport, such as scattering due to impurities and structural defects. In view of the great practical interest for the development of new technologies and combined with the fact that new lamellar materials prove to be quite promising in the design of nanoscale devices, in this work we investigate the transport properties in isotropic and anisotropic two-dimensional (2D) semiconductor materials in the presence of a superlattice generated by a sequence of potential barriers with rectangular and linear profiles. The anisotropic transport signatures with respect to the number of potential barriers, as well as the height and width of the barriers and their orientation in the crystal are analyzed. To do so, we first present the concepts and basic physical properties related to the transfer matrix method, using Hamiltonians within the effective mass approximation, and the formalism of the equilibrium Green's function combined with the equation of motion technique. In addition, we discuss (i) the calculation of the transmission through an arbitrarily profiled quantum potential via the transfer matrix method; and (ii) the calculation of the density of states and the transmission coefficient, via the recursive method of the equilibrium Green's function, in 1D and 2D discrete lattices of non-interacting electrons described by tight-binding Hamiltonians, exemplifying with the cases of few-sites lattice (1, 2 and 3), finite and infinite linear chains, and 2D lattices (square, graphene and phosphorene).

Keywords: Electronic transport; Two-dimensional anisotropic semiconductors; Transfer matrix method; Equilibrium Green's function formalism.

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Diagrama de bandas de energia para metais (à esquerda), isolantes (ao meio) e semicondutores (à direita) definido por A. Wilson (L e S, 1992)(Lukasiak e Jakubowski, 2010). A região com ausência de energias permitidas é intitulada como <i>band gap</i> (do inglês, lacuna de banda).</p>	25
<p>Figura 2 – Representação de quatro estruturas alótropas do carbono: grafite (à esquerda superior), diamante (à direita superior), fulereno (à esquerda inferior) e nanotubo de carbono (à direita inferior).</p>	27
<p>Figura 3 – Processo de esfoliação mecânica utilizado no grafite para a obtenção do grafeno. Figura adaptada da Ref. (Novoselov, 2011).</p>	28
<p>Figura 4 – Representamos no painel (a) a visão superior de uma monocamada de fósforo negro. No painel (b) apresentamos um <i>bulk</i> formado por três monocamadas do fósforo negro.</p>	30
<p>Figura 5 – (a) Estrutura cristalina do fosforeno, indicando os vetores primitivos da rede real, \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2. (b) Primeira zona de Brillouin e os pontos de alta simetria: Γ, X, Y, e S. (c) Relação de dispersão de uma monocamada de fósforo negro ao longo dos pontos de alta simetrias. Espectro de energia foi obtido utilizando modelo <i>tight-binding</i> simplificado com apenas dois <i>hoppings</i>, t_1 e t_2, como indicado no painel (a), e discutido no Capítulo 4.</p>	31
<p>Figura 6 – (a) Representação esquemática de heterojunções semicondutoras na formação de um sistema de gás de elétrons bidimensional. A junção é formada pelo Al-GaAs dopado do tipo n e pelo GaAs. (b) Alinhamento das bandas de energia (E_c: banda de condução e E_v: banda de valência) dos dois semicondutores que formam a heterojunção, ilustrando a posição do nível de Fermi E_f em cada um deles. À direita, representa-se a distorção das bandas de energia com a formação de potencial do tipo triangular.</p>	32

Figura 7 – (a) Estrutura de bandas de um semicondutor qualquer, destacando as bandas de condução (vermelho) e valência (azul). O fundo da banda de condução e o topo da banda de valência são aproximados por relações de dispersões parabólicas. (b) Ilustração de estrutura de bandas de um semicondutor anisotrópico, sendo aproximado via método da massa efetiva por parábolas com diferentes concavidades ao longo das diferentes direções: uma para a direção x ($\Gamma - X$, pontilhado azul) e uma para direção y ($\Gamma - Y$, pontilhado verde).	33
Figura 8 – Representação dos estados k do sistema, assumindo uma condição periódica.	37
Figura 9 – Representação da função de Fermi no interior da banda no (a) caso para altas temperaturas (não degenerado) e (b) para baixas temperaturas (degenerado).	38
Figura 10 – Condutor retangular com direção x uniforme e potencial transversal $U(y)$	39
Figura 11 – Relação de dispersão para n níveis de energias para um sistema sujeito a um potencial transversal parabólico.	41
Figura 12 – Relação de dispersão para um sistema sem campo elétrico e com campo magnético na direção z	43
Figura 13 – Representação do transporte balístico.	45
Figura 14 – Relação de dispersão para o condutor balístico, considerando contatos sem reflexão(Datta, 1997).	46
Figura 15 – Representação esquemática de uma transmissão T através de dois <i>Leads</i> conectados a um condutores em um sistema com temperatura igual a zero.	48
Figura 16 – Sistema com dois centros de espalhamento conectados em série, onde cada espalhador tem transmissões e reflexões T_1 e R_1 , T_2 e R_2 sucessivamente para seus respectivos centros de espalhamento.	50
Figura 17 – Sistema de espalhamento com transmissão T , separado em quatro regiões. Lado direito próximo ao espalhador e longe do espalhador, lado esquerdo próximo do espalhador e longe do espalhador.	53
Figura 18 – Função de distribuição para os <i>Lead</i> 1 e 2 nas regiões mais distantes do espalhador.	54
Figura 19 – Distribuição do potencial eletroquímico normalizado ao longo do espalhador.	55
Figura 20 – Sistema com quatro terminais para medir a queda de voltagem no espalhador.	55
Figura 21 – Sistema com quatro terminais para medir a queda de voltagem no espalhador, onde os Probes são diferentes.	56
Figura 22 – Sistema com espalhador ao considerar o fluxo de corrente de 1 para 2 e 2 para 1.	57

Figura 23 – Representação considerando três terminais, onde apresentamos duas configurações distintas. O Lado esquerdo é para a resistência entre os <i>LEADs</i> 1 e 3, quanto ao lado direito, é para a resistência entre os <i>LEADs</i> 2 e 3.	61
Figura 24 – Quatro terminais representados de duas formas distintas, das quais são, (a) resistência entre os <i>leads</i> 1 e 4 e (b) resistência entre os <i>leads</i> 2 e 3.	62
Figura 25 – Relação das ondas de chegada e de saída para um sistema de potencial unidimensional qualquer.	65
Figura 26 – Simetria de Reversão temporal.	71
Figura 27 – Elétrons sendo injetados da direita para a esquerda e a representação das funções de onda de entrada e saída da região de espalhamento.	74
Figura 28 – Visualização geométrica do espectro de energia para uma energia fixa, mostrando o sistema rotacionado e o sistema sem rotação, juntamente com as direções da velocidade de grupo e vetor de onda.	91
Figura 29 – (a) Esquema de um típico experimento de espalhamento. As ondas Ψ_L^+ e Ψ_R^- são espalhadas pela amostra, caracterizada pelo potencial $U(x)$, enquanto que as ondas Ψ_L^- e Ψ_R^+ consistem nas ondas refletidas e transmitidas, respectivamente, através da amostra. (b) Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma sequência de barreiras a ser considerado no método da matriz de transferência.	99
Figura 30 – Resultados para a transmissão eletrônica considerando diferentes direções de incidência, onde os painéis da esquerda são as curvas de contorno e os da direita são obtidas tomando uma reta horizontal dos gráficos de contorno. Os pares de painéis de cima para baixo são para ângulos $\alpha = 0, 30, 60, 90^\circ$. . .	103
Figura 31 – (a) Curva de contorno de energia para a transmissões em diferentes direções cristalográficas α com angulo de incidência normal k_y . (b) Transmissão em função da energia para ângulos fixos, referente a uma linha vertical do painel (a). (c) Transmissão em função do ângulo para energias fixas, referente a uma reta horizontal do painel (a). (d) Plote do tipo de potencial considerada no problema.	104

Figura 32 – (a) Barreiras de potenciais com larguras $d = 50$ nm, $d = 100$ nm e $d = 200$ nm. (b) e (c) A transmissão eletrônica para diferentes ângulos de incidências associado ao k_y , considerando diferentes direções cristalográficas. (d) e (e) Transmissão em função da energia para incidência normal com ângulo $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$	105
Figura 33 – (a) Barreiras de potenciais com larguras $d = 50$ nm, $d = 100$ nm e $d = 200$ nm. (b) e (c) A transmissão eletrônica para diferentes ângulos de incidências associado ao k_y , considerando diferentes direções cristalográficas. (d) e (e) Transmissão em função da energia para incidência normal com ângulo $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$	106
Figura 34 – Resultados para a transmissão eletrônica em função de k_y e os diferentes potenciais usados, onde a primeira linha de plots mostram a forma da barreira de potencial e o número de barreiras usadas e os painéis a partir da segunda linha da esquerda para direita mostram a transmissões para $N = 1, 2, 3$ e 10 barreiras de potenciais variando a largura da barreira em $d = 5, 10$ e 20 nm. Fixou-se a energia como sendo $E = 0, 15$ eV e espaçamento de $L = 5$ nm.	107
Figura 35 – Função de Green retardada e avançada para um sistema unidimensional.	115
Figura 36 – Representação do acoplamento dos <i>Lead</i> esquerdo e direito com o condutor central.	116
Figura 37 – Representação da função espectral para acoplamentos fracos e fortes, onde os picos das funções correspondem aos autovalores do condutor isolado (Datta, 1997).	123
Figura 38 – Representação de um sistema isolado sendo ligado a um outro sistema que a priori também estava isolado, formando um sistema acoplado pelo parâmetro t_{12} que está associado a ligação da direita para esquerda.	125
Figura 39 – Representação de múltiplos subsistemas acoplados aos eletrodos esquerdos e direitos de autoenergia Σ_L e Σ_R , onde o subsistema H_{11} até H_{NN} podem ser vistos como único sistema que compõe um Hamiltoniano tridiagonal com os elementos H_{ij} . Os termos H_{ij} para $i = j$ são as energias internas de cada subsistema e para $i \neq j$ são os termos de acoplamento.	128

Figura 40 – (a) Densidade de estado e (b) função espectral para o sistema de um sítio isolado, isto é, no caso em que a função de Green retardada (G^R) é a própria função de Green não-vestida g^r (ou equivalentemente, não-perturbada) dada pela Eq. (4.124) (ou similarmente à Eq. (4.144)). Diferentes valores de <i>broadening</i> η e energia local ϵ_0 . Tais gráficos podem ser obtidos plotando as Eqs. (4.111b) e (4.125), respectivamente para os painéis (a) e (b)	131
Figura 41 – (a) Função espectral e (b) densidade de estados para o sistema de um sítio isolado, isto é, no caso em que a função de Green retardada (G^R) é a própria função de Green não-vestida g^r (ou equivalentemente, não-perturbada) dada pela Eq. (4.124) (ou similarmente à Eq. (4.144)). Diferentes valores de <i>broadening</i> η e energia local ϵ_0 são assumidos. Tais gráficos podem ser obtidos plotando as Eqs. (4.111b) e (4.125), respectivamente para os painéis (a) e (b).	133
Figura 42 – Sistema de cadeia linear infinito, para o caso particular em que todos os sítios são idênticos, onde t representa o <i>hopping</i> devido aos primeiros vizinhos mais próximos da esquerda para direita e t^* da direita para esquerda, na qual ϵ_0 é a energia de um sítio individual.	135
Figura 43 – Representação para um sistema com dois sítios 1 e 2 distintos, onde os parâmetros de acoplamento podem ser vistos como t_{12} da esquerda para direita e $t_{21} = t_{21}^*$ da direita para esquerda.	136
Figura 44 – Representação para um sistema com sítios semi-infinito, onde os parâmetros de acoplamento podem ser vistos como t_{ij} , sendo o acoplamento do sítio i com o sítio j (acoplamento da esquerda com a direita). Por simetria do sistema, podemos dizer que $t_{ij} = t_{ji}$, em que é visto como o acoplamento inverso (da direita para esquerda).	140
Figura 45 – Densidade de estados para uma cadeia linear (a) semi-infinita e (b) infinita para infinitos sítios vestidos, obtidos a partir da Eq. (4.82) utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1,0$	141
Figura 46 – (a) Representação para um sistema com dois sítios semi-infinita, formando uma cadeia infinita, onde estão sendo envelopadas ambas as cadeias. (b) Os sítios semi-infinitos da esquerda são vistos como o sítio efetivo $\bar{1}$ e os sítios semi-infinitos da direita são vistos como o sítio efetivo $\bar{2}$, juntamente com os parâmetros de acoplamento \bar{t}_{12} e \bar{t}_{12}^*	142

Figura 47 – (a) Representação para um sistema com três sítios, cujos parâmetros de acoplamento da esquerda para direita são t_{12} e t_{23} e da direita para esquerda são t_{12}^* e t_{23}^*	143
Figura 48 – Esquema representando o funcionamento do método da decimação, onde o método começa com (a) três sítios, (b) adiciona mais dois sítios entre as interações, (c) envolve os sítios que podem ser vistos como um único sítio efetivo e (d) retorna a forma de três sítios iniciais e recomeça o processo voltando para o (b).	150
Figura 49 – Resultados das densidades de estados de superfície e <i>bulk</i> (painel superior e inferior) para $N = 0$ até $N = 8$, mostrando o crescimento do número de picos até chegar no resultado da cadeia linear semi-infinita e infinita da Fig. 45, obtidos a partir das funções de Green de superfície ($G_1(1, 1)$ e $G_3(1, 1)$) e função de Green de <i>bulk</i> ($G_2(1, 1)$).	152
Figura 50 – Resultados das densidades de estados da cadeia semi-infinita (painel superior) e infinita (painel inferior) para $N = 0$ até $N = 8$, comparando os resultados da decimação (linha preta) com o resultado analítico (linha tracejada vermelha) das Eqs.(4.157) e (4.159), utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1,0$	153
Figura 51 – Sistema bidimensional com seis sítios dispostos em duas camadas de três sítios, chamado aqui de sistema bidimensional escada.	154
Figura 52 – Resultado da densidade de estados de superfície (painel superior) e <i>bulk</i> (painel inferior) para o caso da cadeia escada, considerando valores de $N = 0$ até $N = 8$, obtidos a partir das funções de Green de superfície $G_1(1, 1)$ e $G_3(1, 1)$ e função de Green de <i>bulk</i> $G_2(1, 1)$ para decimação escada utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1$	159
Figura 53 – Representação de uma rede quadrada com n colunas e m camadas. Em que apresentamos termos de acoplamento $t_{ij,t'j'}$ que ligam um sítio com todos os outros de uma mesma coluna e os <i>hopping</i> que ligam os átomos em colunas consecutivas.	161
Figura 54 – Resultado da densidade para o caso da cadeia quadrada, considerando valores de $N = 0$ até $N = 8$, obtidos a partir das funções de Green de superfície $G_1(1, 1)$ e $G_3(1, 1)$ e função de Green de <i>bulk</i> $G_2(1, 1)$, utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1$	163

- Figura 55 – (a) Representação de nanofita de grafeno com bordas *armchair*. (b) Mapeamento da nanofita de grafeno em rede de tijólos. A direção horizontal é infinita e a direção vertical terá comprimento relacionado com o número de sítios em cada fatia. Cada fatia possui m sítios. As n fatias estão envolvidas no processo de decimação. 164
- Figura 56 – (a) Representação de nanofita de grafeno com bordas *zigzag*. (b) Mapeamento da nanofita de grafeno em rede de tijólos. A direção horizontal é infinita e a direção vertical terá comprimento relacionado com o número de sítios em cada fatia. Cada fatia possui m sítios. As n fatias estão envolvidas no processo de decimação. 166
- Figura 57 – Densidade de estados para nanofitas de grafeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores) com diferentes tamanhos: (a, d) $N = 4$, (b, e) $N = 5$, e (c, f) $N = 30$, tomando $\eta = 0.01$, $t = 2.7$ eV, e $n = 4, 5, 30$ para o caso *armchair* e $n = 8, 10, 60$ para o caso *zigzag*. 168
- Figura 58 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade dos estados $D(E)$ de nanofitas de grafeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores) com diferentes larguras: (a, d) $N = 4$, (b, e) $N = 5$, e (c, f) $N = 30$. Adaptado da Ref. (Wakabayashi *et al.*, 2009). 168
- Figura 59 – (a) Representação de nanofita de fosforeno com bordas *zigzag*. (b) Mapeamento da nanofita de fosforeno em rede de tijólos anisotrópica, devido aos *hoppings* distintos dependendo das ligações. Ligações em amarelo são associadas aos *hoppings* t_1 entre sítios em uma mesma subcamada e em cor preta denotamos os *hoppings* t_2 entre sítios de subcamadas distintas. A largura da nanoestrutura está associada ao número de linhas m de átomos de fósforo. n corresponde o número de fatias utilizadas no processo recursivo de decimação *surface-bulk*. Os átomos vermelhos e azuis representam os átomos de subcamadas distintas. 170

Figura 60 – (a) Representação de nanofita de fosforeno com bordas *armchair*. (b) Mapeamento da nanofita de fosforeno em rede de tijólos anisotrópica, devido aos *hoppings* distintos dependendo das ligações. Ligações em amarelo são associadas aos *hoppings* t_1 entre sítios em uma mesma subcamada e em cor preta denotamos os *hoppings* t_2 entre sítios de subcamadas distintas. A largura da nanoestrutura está associada ao número de linhas m de átomos de fósforo. n corresponde o número de fatias utilizadas no processo recursivo de decimação *surface-bulk*. Os átomos vermelhos e azuis representam os átomos de subcamadas distintas. 172

Figura 61 – Relações de dispersão e densidade dos estados de nanofitas de fosforeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores), assumindo diferentes larguras: (a, b, e, f) $N = 5$ e (c, d, g, h) $N = 30$. Assumimos $\eta = 0.01$ para o valor do *broadening*. 174

LISTA DE SÍMBOLOS

v_f	Velocidade de Fermi
\hbar	Constante de Planck
l_m	Livre Caminho Médio
l_ϕ	Comprimento de Relaxamento de Fase
E_f	Energia de Fermi
k_x	Número de Onda na direção x
k_y	Número de Onda na direção y
v_g	Velocidade de Grupo

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Uma breve história sobre semicondutores	23
1.2	Evolução histórica da teoria dos sólidos	24
1.3	O surgimento das nanoestruturas bidimensionais	25
1.4	Gás de elétron bidimensional	31
1.5	Semicondutores Isotrópicos <i>versus</i> Semicondutores Anisotrópicos	33
1.6	Escopo da Dissertação	35
2	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS	37
2.1	Condutor degenerado e não degenerado	37
2.2	Modos Transversais	39
2.3	Transporte Balístico	44
2.4	Fórmula de Landauer	47
2.5	Portenciais Eletroquímicos e a Probe Voltagem	52
2.6	Formula de Büttiker	57
2.6.1	<i>Caso degenerado</i>	57
2.6.2	<i>Três Terminais</i>	60
2.6.3	<i>Quatro Terminais</i>	61
3	MATRIZ DE TRANSFERÊNCIAS E SUAS APLICAÇÕES	64
3.1	Matriz de transferência e espalhamento	64
3.1.1	<i>Potencial unidimensional</i>	64
3.1.2	<i>Conservação da densidade de corrente</i>	67
3.1.2.1	<i>Propriedades da matriz S</i>	69
3.1.3	<i>Simetria de conservação de reversão temporal e matriz S/M</i>	71
3.2	Amplitude de transmissão e reflexão	73
3.2.1	<i>Propriedades da matriz de transferência</i>	76
3.2.2	<i>Múltiplas regiões de espalhamento</i>	77
3.2.3	<i>Estados propagantes</i>	78
3.2.4	<i>Estados ligados</i>	80
3.3	Identidade de Chebyshev	81
3.3.1	<i>Transmissão através de N barreiras idênticas</i>	84
3.3.2	<i>Caso de uma junção PN</i>	85

3.4	Potencial linear: Caso isotrópico	87
3.4.1	<i>Tunelamento</i>	88
3.5	Potencial linear: Caso Anisotrópico	90
3.5.1	<i>Caso de uma barreira de potencial linear anisotrópico</i>	94
3.5.2	<i>Estados Ligados</i>	96
3.5.3	<i>Múltiplas barreiras de potencial linear</i>	96
3.6	Barreira de potencial qualquer	99
3.7	Resultados e Discussões	102
4	APLICAÇÃO DO MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN NO TRANSPORTE ELETRÔNICO	108
4.1	Propagador de Evolução Temporal e a função de Green	108
4.2	Função de Green interagente para férmions e a equação de movimento .	111
4.2.1	<i>Função de Green nas Coordenadas Representativas</i>	113
4.3	Definição da autoenergia	115
4.4	Algumas propriedades da função de Green	118
4.4.1	<i>Cálculo da Corrente</i>	118
4.4.2	<i>Cálculo da Transmissão</i>	119
4.4.3	<i>Densidade de estados</i>	120
4.4.4	<i>Função Espectral</i>	121
4.5	Método recursivo	124
4.5.1	<i>Equação de Dyson</i>	124
4.5.2	<i>Metodo Recursivo Para Sistemas Unidimensionais</i>	127
4.6	Calculando a transmissão para um e dois níveis	130
4.6.1	<i>Modelo de um nível</i>	130
4.6.2	<i>Modelo de dois níveis</i>	132
4.7	Sistema de cadeia linear não-interagente	134
4.7.1	<i>Hamiltoniano da cadeia linear</i>	135
4.7.2	<i>Cadeia linear de dois sítios</i>	136
4.7.3	<i>Cadeia linear semi-infinita e infinita</i>	139
4.7.4	<i>Sistema com cadeia linear de três sítios</i>	143
4.8	Função de Green recursiva: Método da decimação da função de Green de superfície e superfície-bulk	146
4.8.1	<i>Decimação da função de Green de superfície</i>	146

4.8.2	<i>Decimação da função de Green de superfície-bulk</i>	149
4.8.2.1	<i>Exemplo: Cadeia linear</i>	149
4.8.2.2	<i>Exemplo: Cadeia escada</i>	154
4.8.2.3	<i>Exemplo: Rede quadrada</i>	160
4.8.2.4	<i>Exemplo: Grafeno</i>	162
4.8.2.5	<i>Exemplo: Fosforeno</i>	169
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	175
	REFERÊNCIAS	177

1 INTRODUÇÃO

1.1 Uma breve história sobre semicondutores

As diversas ferramentas produzidas pela humanidade influenciaram em seu desenvolvimento e capacidade de sobrevivência em meio ao mundo. Podemos observar estes eventos na criação da roda, materiais de caça, ferramentas agrícolas, etc. O mesmo acontece com o desenvolvimento dos materiais semicondutores que melhoraram significativamente a capacidade de comunicação, processamento de dados, na robotização da produção de tecnologias e alimentos. A utilização deste termo foi introduzida por Alessandro Volta em 1782 (Busch, 1989),(Volta, 1782), o qual utilizou a expressão “materiais de natureza semicondutora” para descrever alguns materiais durante seus experimentos com uma pilha, que foi uma de suas invenções. Ele verificou a velocidade com que vários materiais se descarregavam ao serem colocados em contato com um eletrômetro e determinou que: os isolantes não se descarregam, enquanto os metais se descarregam mais rapidamente que os semicondutores (Volta, 1782). Os primeiros estudos sobre eletricidade se deram muito antes de Alexander Volta, 600 a.c., mas somente de 1666 a 1736 que ocorreram os primeiros experimentos voltados ao estudo da condução elétrica, realizados por Stephen Gray. Mais especificamente em 1729, foi observado que seria possível transferir carga de um bastão de vidro para uma bolinha de marfim suspensa por um barbante, mas isso não ocorreria se trocasse o barbante por um metal (Gray, 1731).

Os primeiros documentos formais de estudos sobre os semicondutores vieram a ser publicados por Michael Faraday em 1833 (Faraday; Davy, 1833, 1821). Faraday se baseou nos estudos de Humphry Davy sobre a influência da temperatura em diversos metais, tais como cobre (Cu), alumínio (Ag), platina (Pt) e vários outros. Davy concluiu que a condutividade é inversamente proporcional à temperatura do material. Posteriormente, Faraday ampliou esse estudo e verificou que alguns materiais tinham comportamento diferente dos observados por Davy, em especial o sulfeto de prata (Ag_2S) e sulfeto de cobre (Cu_2S). No caso de Ag_2S , foi observado que a condutividade era baixa para baixas temperaturas e muito grande para temperaturas acima de 172°C . Esses estudos vieram a ser os primeiros documentos formais sobre os semicondutores, entretanto foram mais baseados em análises qualitativas. Os primeiros estudos quantitativos foram realizados por Johan Hittorf em 1851 (Busch, 1989)(Hittorf, 1851), o qual fez experimentos com Ag_2S e Cu_2S e comparou a resistividade com o comprimento de platina e cobre, cujos resultados obtidos são apresentados por G. Busch (Busch, 1989) que

resumiu todos os resultados de Hittorf (Hittorf, 1851), mostrando que a resistividade apresenta uma proporcionalidade com a exponencial de $1000/T$, sendo essa a relação que caracteriza um semicondutor.

A história dos semicondutores é marcada pelo estudo de duas propriedades muito importantes, que são conhecidas por retificação e efeito fotovoltaico. A condução e retificação em semicondutores foram observadas primeiramente por Karl Ferdinand Braun em 1874, que estudava o fluxo de corrente em diferentes sulfetos e fios metálicos que os conectavam (Braun, 1874)(Sarkar e Mailloux, 2006). O primeiro dispositivo criado utilizando os semicondutores ficou conhecido como “*cat’s whiskers*”, o que foi futuramente utilizado por Hertz para mostrar a existência de ondas de rádio, entretanto a primeira patente desse dispositivo foi somente publicada em 1901 por Jagadish Chandra Bose.

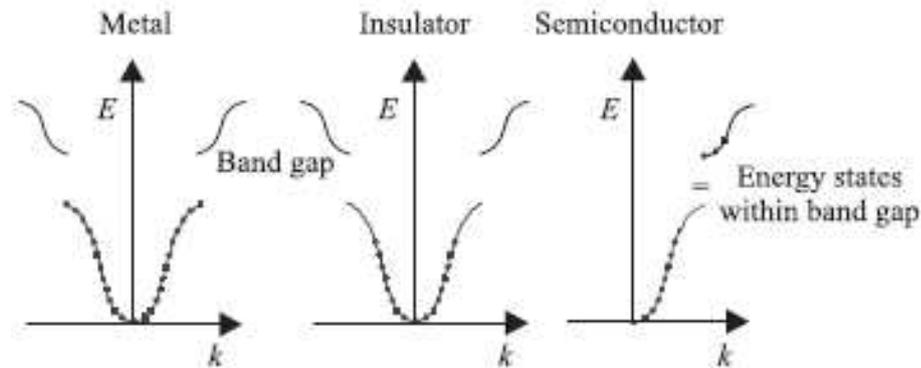
O efeito fotovoltaico foi observado por Alexandre Edmond Becquerel em 1839, ao estudar as junções de semicondutores. Em seu experimento foram utilizados eletrodos de cloreto de prata recobertos por platina em uma solução aquosa eletrolítica de ácido nítrico, onde foi observado que ao iluminar um dos eletrodos, a força eletromotriz foi intensificada entre os eletrodos (L e S, 1992)(Lukasiak e Jakubowski, 2010). Posteriormente, Willoughby Smith descobriu a fotocondutividade em sólidos, em 1873, ao fazer experimentos com selênio (Se). Ele notou que a resistividade diminuía drasticamente quando uma luz incidia sobre este material (Orton, 2004). William Grylls Adams e Richard Evans Day foram os primeiros a descobrir o efeito fotovoltaico em um material sólido nos anos de 1876. Eles notaram que a presença de luz pode mudar a direção da corrente fluindo através do selênio conectado a uma bateria. A primeira célula solar funcional foi construída por Charles Fritts em 1883.

1.2 Evolução histórica da teoria dos sólidos

O estudo sobre os semicondutores de forma mais quantitativa, veio com o desenvolvimento da mecânica quântica ao estudar os materiais sólidos. O primeiro trabalho voltado para esta área foi realizado por Maximillian Strutt, o qual resolveu a equação de Schrödinger para um potencial periódico e obteve a equação diferencial de Mathieu já descoberta em 1873 por Floquet. Em sua visão, estes resultados poderiam ser usados para entender melhor os condutores metálicos e particularmente a supercondutividade (Strutt, 1928). Posteriormente, esse estudo foi continuado por Felix Bloch em 1928, o qual apresentou as conhecidas funções de Bloch e desenvolveu a teoria dos elétrons em uma rede (L e S, 1992)(Bloch, 1928). Dois anos depois,

Kronig e Penney desenvolveram um modelo simples para o potencial periódico (Lukasiak e Jakubowski, 2010)(Kronig e Penney, 1931).

Figura 1 – Diagrama de bandas de energia para metais (à esquerda), isolantes (ao meio) e semicondutores (à direita) definido por A. Wilson (L e S, 1992)(Lukasiak e Jakubowski, 2010). A região com ausência de energias permitidas é intitulada como *band gap* (do inglês, lacuna de banda).



Fonte: (L e S, 1992)(Lukasiak e Jakubowski, 2010)

Em 1931 Alan Wilson desenvolveu um dos trabalhos-chave sobre a teoria dos sólidos. Na Fig. 1 podemos observar como Wilson representou o primeiro diagrama de bandas, diferenciando os metais (à esquerda), isolantes (ao meio) e semicondutores (à direita). Em seu trabalho, ele estabeleceu uma diferença entre os semicondutores como intrínsecos e extrínsecos, usando a ideia de doadores e aceitadores (L e S, 1992)(Lukasiak e Jakubowski, 2010). No mesmo ano desta publicação, Heisenberg apresentou o conceito de buracos, como sendo os espaços vazios nas bandas de energia que agem como elétrons positivos (Lukasiak e Jakubowski, 2010). Alguns anos depois, em 1938, Walter Schottky e Neville F. Mott desenvolveram independentemente modelos da barreira de potencial e do fluxo de corrente via uma junção metal-semicondutor. Um ano depois, Schottky melhorou seu modelo, incluindo a presença de carga espacial. Também em 1938, Boris Davydov apresentou uma teoria de um retificador de óxido de cobre incluindo a presença de uma junção p-n no óxido, excesso de portadores e recombinação. Ele também entendeu a importância dos estados de superfície (Lukasiak e Jakubowski, 2010)(Lojek, 2007). Em 1942, Hans Bethe desenvolveu a teoria da emissão termiônica (Lojek, 2007).

1.3 O surgimento das nanoestruturas bidimensionais

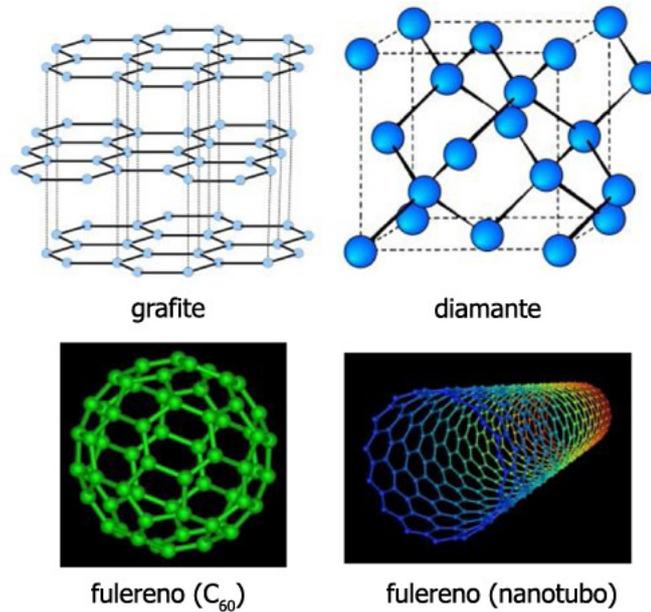
As nanoestruturas são extremamente importantes para o estudo de transporte eletrônico e apresenta uma gigantesca variedade de aplicações na sociedade. No passado muitos

cientistas estudaram materiais com escalas nanométricas, tal como Richard Adolf Zsigmondy, que estudou várias estruturas com escalas de 10^{-9} m e Irving Langmuir, introduziu o termo “*monolayer*”, para caracterizar uma camada de um material com largura de uma molécula (Gugliotti, 2001). O conceito de nanotecnologia veio a ganhar forma, historicamente em 1959, durante uma palestra de Richard Feynman, na qual apresentou a ideia de manipularmos átomos ou pequenas moléculas ao ponto de gerar pequenas estruturas, cujas dimensões fossem extremamente pequenas (Costa *et al.*, 2016). Essa discussão deu início aos avanços tecnológicos na direção da nanociência, os quais um dos objetivos principais é estudar formas de manipulação de átomos em escalas microscópicas. Entretanto o termo “nanotecnologia” só veio a ser utilizado alguns anos depois por Norio Taniguchi, que apresentou grandes contribuições na área, afirmando que a nanotecnologia consiste no processo de separação, consolidação e deformação de átomo por átomo (Taniguchi, 1974)(Biasotto, 2015).

O período que veio alavancar o estudo da nanotecnologia foi a década de 80, marcada pela invenção do microscópio de varredura por tunelamento, desenvolvido por Gerd Binnig e Heinrich Rohrer, dando a ciência uma nova técnica para estudar e visualizar as estruturas em escalas nanométricas (Galembeck *et al.*, 2013)(Binnig e Rohrer, 1982). Em 1985, uma nova forma alotrópica do carbono, conhecido como fulereno, foi descoberta por Harold W. Kroto, Robert F. Curl e Richard E. Smalley, os quais vieram a ganhar o prêmio Nobel de química em 1996 (Kroto *et al.*, 1985). Um dos fulerenos mais conhecidos é o C_{60} , consistindo em 60 átomos de carbono estruturados em uma cúpula geodésica composta por 20 hexágonos e 12 pentágonos, com um carbono em cada vértice, agrupando-se de forma semelhante a uma bola de futebol (ver Fig. 2). Essa estrutura é umas das principais formas do carbono e é mais resistente que o diamante. Entretanto ela é bastante tóxica para o organismo humano, por este motivo acabou não sendo muito utilizado em fins práticos.

Seguindo o curso da história, a década de 90 foi marcada pela publicação de Sumio Iijima, que apresentou pela primeira vez a existência de nanotubos, que são basicamente formados por uma camada de grafite enrolada de forma que as extremidades são conectadas, tendo a forma de um tubo (ver Fig. 2) (Iijima, 1991). Uma característica importante desses materiais é que eles podem ser condutores ou semicondutores, dependendo da maneira em que são enrolados em relação à estrutura da rede bidimensional da folha de grafite (Ferry e Goodnick, 1999). Isso reflete diretamente na sua capacidade condutora que é muito maior que um fio de cobre, por exemplo. Eles possuem também uma alta condução térmica, podendo ser utilizados na conversão de energia em placas solares (Mor *et al.*, 2006), apresentam uma resistência superior a do aço

Figura 2 – Representação de quatro estruturas alótropas do carbono: grafite (à esquerda superior), diamante (à direita superior), fulereno (à esquerda inferior) e nanotubo de carbono (à direita inferior).



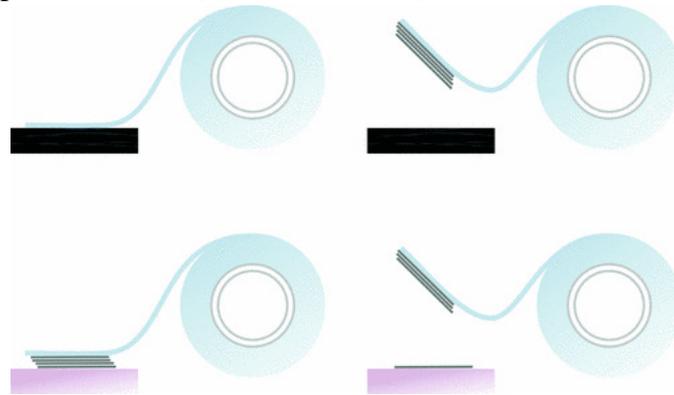
Fonte: Elaborada pelo autor

e são muito menos densos que este, tendo uso prático como, por exemplo, na construção civil (Yakovlev *et al.*, 2013).

Após os nanotubos, vários outros materiais foram desenvolvidos e influenciaram na forma como a tecnologia foi evoluindo. Essas nanoestruturas apresentam propriedades ligadas diretamente à dimensionalidade do sistema. Tais materiais manifestam uma estrutura cujos elétrons estão confinados em uma ou mais dimensões, ficando livres para se moverem em duas dimensões ou menos. Quando nos referimos a confinamento, estamos falando do aprisionamento do elétron em uma região muito pequena do espaço. Por exemplo, um sistema cujas dimensões nas direções x e y sejam muito pequenas comparadas ao eixo z, pode ser visto como um exemplo de fios quânticos, por outro lado, as nanofitas são estruturas com apenas uma dimensão muito pequena. Com relação às nanoestruturas de confinamento em grafeno, os físicos Ritter e Lyding (Ritter e Lyding, 2009) observaram que as estruturas das bordas desses materiais têm uma grande influência em suas propriedades.

É interessante ressaltar que a manipulação dos materiais volumétricos (do inglês *bulk*) em versões com dimensionalidades reduzidas, tais que uma certa dimensão é muito menor em comparação as demais, permite por sua vez a modificação e adequação das propriedades optoeletrônicas e de transporte, por exemplo, para as aplicações desejadas. Quando se refere a um material bidimensional ou unidimensional, associa-se a essa liberdade de mobilidade dos

Figura 3 – Processo de esfoliação mecânica utilizado no grafite para a obtenção do grafeno. Figura adaptada da Ref. (Novoselov, 2011).



Fonte:(Khan *et al.*, 2014)(Chen *et al.*, 1996)

portadores de carga. Por exemplo, o grafeno como um material bidimensional que na verdade possui a espessura de um átomo, mas mesmo assim considera-se como estrutura bidimensional. No caso das nanofitas estamos aproximando o material para uma estrutura unidimensional, onde podemos estudar o comportamento do elétron através da equação de Schrödinger unidimensional, ou seja, reduzimos o estudo de um material tridimensional para um unidimensional.

A ideia de estudar essas nanoestruturas é compactar o máximo possível os equipamentos eletrônicos, aumentando o seu desempenho e reduzir os custos de produção. Estes materiais vêm ganhando uma grande parte do mercado tecnológico e melhorado o desempenho de computadores, televisões e baterias, por apresentarem propriedades bastante úteis de condutores e serem extremamente finos e maleáveis como, por exemplo: o grafeno que pode ser utilizado para a criação de micro antenas, fotodetectores, moduladores ópticos ou *organic light-emitting diode* (OLEDs) (Dubey *et al.*, 2016). Podemos citar também o óxido de gálio que apresenta aplicações tecnológicas voltadas para a eletroluminescência como *display* eletroluminescente de filme fino, painéis de plasma, lâmpadas fluorescentes e muitas outras aplicações. Também temos as nanofitas de ouro que, por sua vez, podem ser utilizadas para detecção química e biológica, optoeletrônica, terapia térmica com foto imagem biomédica, rotulagem de ácido desoxirribonucléico (DNA) (Khan *et al.*, 2014)(Chen *et al.*, 1996), dentre outras.

Quando falamos sobre nanoestruturas, atualmente pensa-se logo nos novos materiais bidimensionais, tais como o grafeno, os dicalcogenetos de metais de transição, o nitreto de boro hexagonal, borofeno e o fosforeno. Esses materiais mostram-se muito importantes devido às suas incríveis propriedades físicas e até mesmo novos fenômenos não observados nas versões *bulk* dos seus constituintes, apresentando assim um grande potencial em aplicações tecnológicas. O grafeno é obtido através do grafite, um material encontrado em abundância na natureza e é

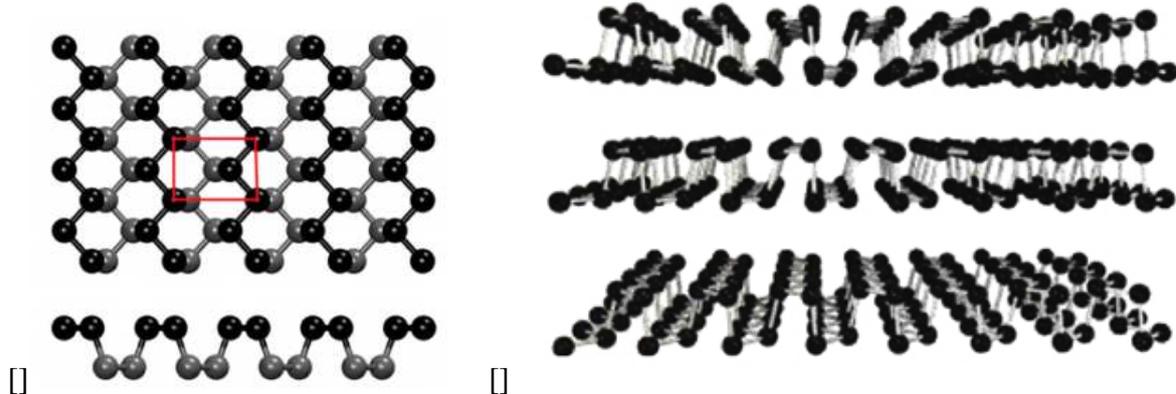
uma das formas alotrópicas mais comuns do carbono. A estrutura do grafeno é composta de carbono conectados em forma de favo de mel, criando uma folha muito fina, com a espessura de um átomo.

O primeiro método utilizado para obtenção do grafeno é chamado de esfoliação mecânica, o qual foi utilizado pelos cientistas André Geim e Konstantin Novoselov em 2004 (Novoselov *et al.*, 2004). Eles partiram de uma estrutura de grafite pirolítico altamente orientado (do inglês, *HOPG - highly oriented pyrolytic graphite*) e utilizaram a esfoliação mecânica para separar as camadas de grafeno manualmente, em um processo repetitivo de removação e deposição das camadas em um substrato, como esquematizado na Fig. 3. Dessa forma, eles obtiveram pela primeira vez uma camada fina de grafeno com espessura de até 10 μm (Zarbin e Oliveira, 2013). Tal feito, apresentou à comunidade científica a possibilidade real de manipular cristais obtendo-os em suas versões bidimensionais, com espessura de um ou poucos átomos.

A forma estrutural do grafeno permite a existência de várias propriedades importantes, tais como altas condutividades elétricas e térmicas. Também é um material com uma resistência de aproximadamente 130 GPa e seu módulo de Young é de 1 TPa, sendo o mais alto já medido (Chen *et al.*, 2010)(Wei e Kivioja, 2013). Devemos também dar ênfase a sua condutividade que é aproximadamente $2 \cdot 10^4$ S/cm e sua mobilidade eletrônica de $2 \cdot 10^5$ $\text{cm}^2/\text{V.s}$, que é muito maior que a do silício. Ainda podemos mencionar uma das suas propriedades ópticas, tal como sua alta transparência que permite a passagem quase completa de toda a luz (Wei e Kivioja, 2013), absorvendo apenas 2,3%. Outra propriedade intrigante é que o seu *gap* de energia é zero, tal que suas bandas de energia são dadas na forma de cones, cujas pontas se tocam em seis pontos de alta simetria da rede recíproca. Tais portadores de cargas de baixas energias, nas proximidades dos seis cones, podem ser descritos por uma teoria efetiva, através da equação de Dirac-Wely, comportando-se como férmions de Dirac sem massa (Geim e MacDonald, 2007).

Seguindo o curso histórico das obtenções dos materiais bidimensionais, após a primeira obtenção do grafeno em 2004, começou aparecer estudos em nitreto de boro hexagonal, que é um material isolante com *gap* de energia da ordem de 5 eV e com formato análogo ao grafeno, mas constituído por dois elementos químicos (B - boro e N - nitrogênio), ao contrário do grafeno, composto apenas por carbono. Intensivos estudos em uma família de materiais, rotulados como dicalcogenetos de metais de transição (com abreviação TMD, do inglês *transition metal dichalcogenide*), e identificados por MX_2 , onde M indica os metais de transição e X os calcogênios, tais como enxofre (S), selênio (Se) e telúrio (Te), ganhou destaque após a obtenção do dissulfeto de molibdênio (MoSe_2) em 2010 (Mak *et al.*, 2010), embora os primeiros relatos

Figura 4 – Representamos no painel (a) a visão superior de uma monocamada de fósforo negro. No painel (b) apresentamos um *bulk* formado por três monocamadas do fósforo negro.

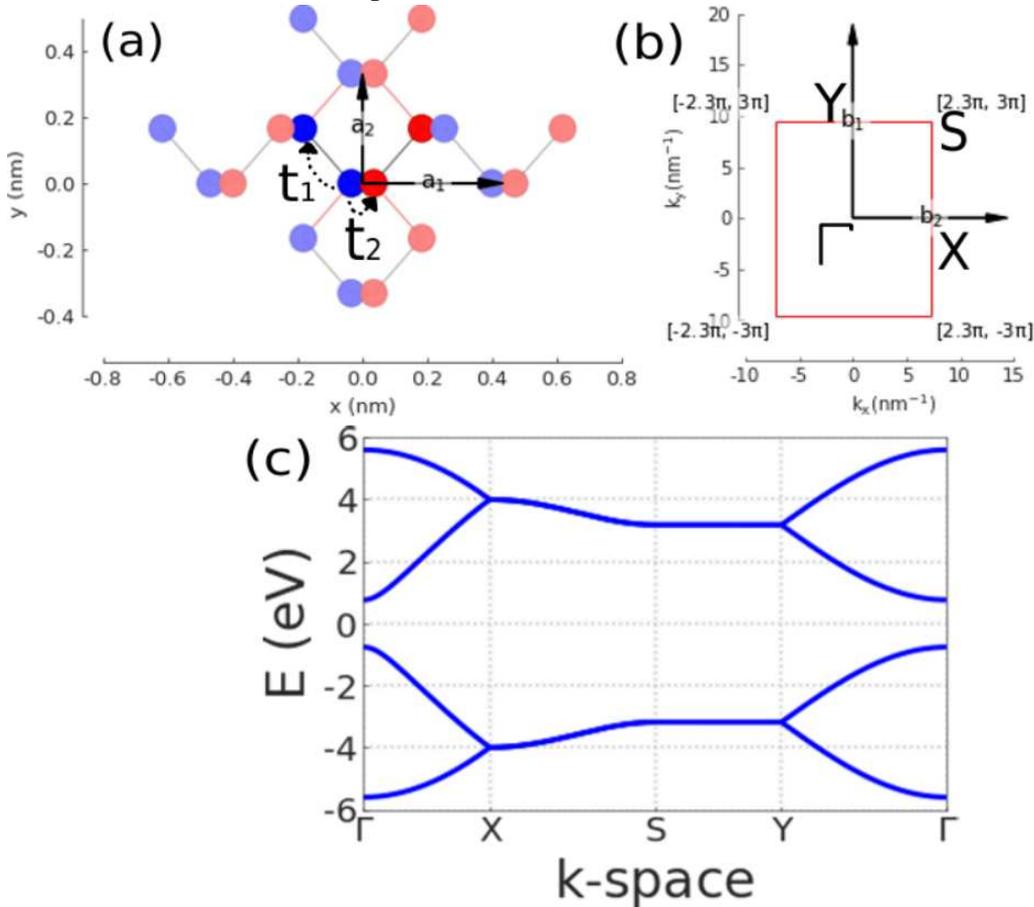


Fonte: <https://www.interempresas.net/MetalMecanica/Articulos/120800-Fosforeno-el-nuevo-semiconductor.html>, acesso em 01 de Nov. 2024

sobre monocamadas de TMD remontam 30 anos atrás (Joensen *et al.*, 1986).

Em 2014, dez anos após a primeira obtenção do grafeno, foi isolado o fosforeno por dois grupos de pesquisas distintos, um na China (Li *et al.*, 2014) e outro nos Estados Unidos (Liu *et al.*, 2014). Essa material lamelar, que é a forma alotrópica mais estável do fósforo, apresenta uma estrutura enrugada interligada por forças de van der Waals de uma maneira muito semelhante ao grafite. A mencionada semelhança com o grafite se deve as fracas ligações de van der Waals entre as camadas que permite que seja possível utilizar o mesmo método de exfoliação mecânica usado para obter o grafeno. Os átomos são organizados de forma que ao longo da direção *armchair* encontra-se uma superfície corrugada, saindo do plano, formando duas subcamadas contendo quatro átomos por célula unitária, tal que em uma vista superior apresente estrutura na forma de favo de mel, como ilustrado na Fig. 4. Sua forma enrugada se deve ao tipo de hibridização sp^3 , e como consequência, esse material apresenta uma estrutura de bandas altamente anisotrópica, levando a várias propriedades físicas serem dependentes da direção cristalográfica, tais como: condutividade térmica, condutividade elétrica, e absorção de luz, por exemplo. (Carvalho *et al.*, 2016)(Khandelwal *et al.*, 2017)(Tahir *et al.*, 2020) Vale ressaltar que o fosforeno é um semiconductor de *gap* direto, isto é, o mínimo da banda de condução está no mesmo ponto do espaço recíproco do máximo da banda de valência, com valor de *gap* de aproximadamente 2 eV, em que a energia depende quase linearmente com o momento ao longo da direção $\Gamma - X$ (*zigzag*), e quadraticamente ao longo da direção $\Gamma - Y$ (*armchair*). A presença do *gap* de energia no fosforeno e sua manipulação através de voltagem externa ou adição de mais camadas, apresentando uma diminuição do valor de *gap* com o aumento do número de camadas, mostram-se propriedades promissoras para sua aplicação em nanoestruturas semicondutoras

Figura 5 – (a) Estrutura cristalina do fosforeno, indicando os vetores primitivos da rede real, \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 . (b) Primeira zona de Brillouin e os pontos de alta simetria: Γ , X, Y, e S. (c) Relação de dispersão de uma monocamada de fósforo negro ao longo dos pontos de alta simetrias. Espectro de energia foi obtido utilizando modelo *tight-binding* simplificado com apenas dois *hoppings*, t_1 e t_2 , como indicado no painel (a), e discutido no Capítulo 4.



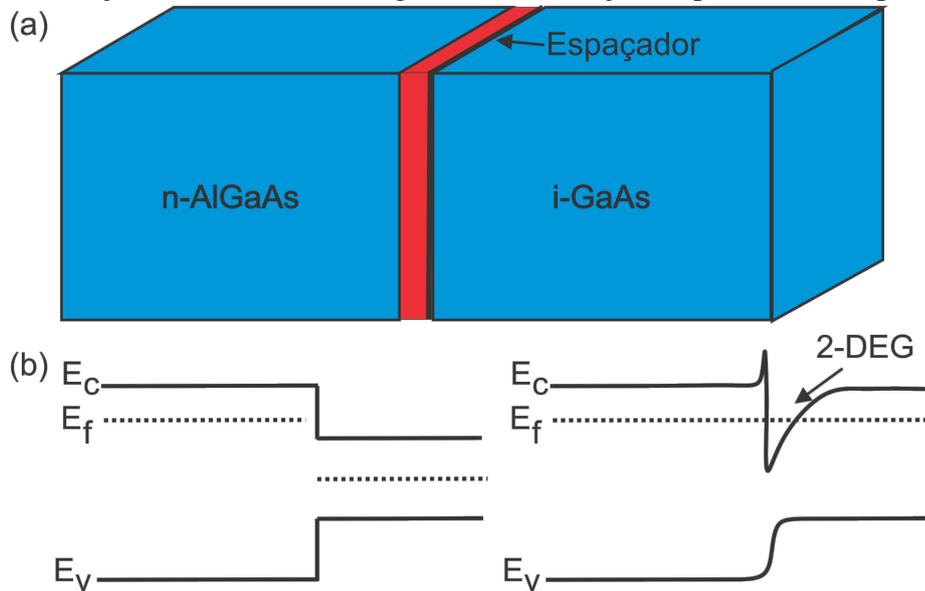
Fonte: Elaborado pelo autor

na criação de dispositivos eletrônicos (Tran *et al.*, 2014)(Castellanos-Gomez *et al.*, 2014). Na Fig. 5 apresentamos o espectro de energia de uma monocamada de fosforeno, notando o aspecto anisotrópico das bandas, como mencionado. Tal espectro de energia foi obtido dentro do modelo *tight-binding* bastante simplificado com apenas dois *hoppings* distintos, cuja abordagem será utilizada e discutida no estudo de nanofitas de fosforeno no Capítulo 4.

1.4 Gás de elétron bidimensional

Agora iremos discutir sobre os efeitos da redução da dimensionalidade em sistemas semicondutores, em especial na formação de heterojunções semicondutoras, que por sua vez é uma das formas de se obter um sistema de gás de elétrons bidimensional. Para este fim e sem

Figura 6 – (a) Representação esquemática de heterojunções semicondutoras na formação de um sistema de gás de elétrons bidimensional. A junção é formada pelo AlGaAs dopado do tipo n e pelo GaAs. (b) Alinhamento das bandas de energia (E_c : banda de condução e E_v : banda de valência) dos dois semicondutores que formam a heterojunção, ilustrando a posição do nível de Fermi E_f em cada um deles. À direita, representa-se a distorção das bandas de energia com a formação de potencial do tipo triangular.



Fonte: Elaborado pelo autor

perda de generalidade, assumimos dois semicondutores, arseneto de gálio e arseneto de gálio e alumínio (AlGaAs), que possuem *gaps* de energia diferentes e que formam uma heterojunção, como ilustrado na Fig. 6. Na junção desses semicondutores, aparecem camadas bidimensionais de condução na direção perpendicular à direção de crescimento da heterojunção (Datta, 1997). Em adição, sabe-se que estes materiais sofrem dopagem (AlGaAs do tipo n e GaAs do tipo p) (Ayling *et al.*, 1994)(Heiblum, 1985) de doadores impuros. Assim, observa-se que os níveis de Fermi para os largos *gaps* do AlGaAs são muito maiores que os baixos *gaps* do GaAs. Essa diferença dos *gaps* de energia e devido aos efeitos eletrostáticos em virtude do acúmulo de cargas nos semicondutores dopados, faz surgir uma distorção nas bandas na interface, que fica descrito por um potencial no formato triangular, como ilustrado na Fig. 6(b). Este potencial triangular confinará os elétrons na direção de crescimento e os portadores de carga possuem mobilidade eletrônica apenas ao longo da direção paralela ao plano da heteroestrutura. Dentro da aproximação da massa efetiva, o mencionado problema pode ser tratado como um elétron livre com uma certa massa efetiva que depende dos semicondutores que formam a heterojunção movendo-se no plano em vermelho indicado na Fig. 6(a). Devido ao confinamento na direção de crescimento e liberdade nas outras duas direções, nomea-se esse sistema como um gás de elétron bidimensional (2DEG). A concentração de portadores em 2DEG tem um intervalo típico

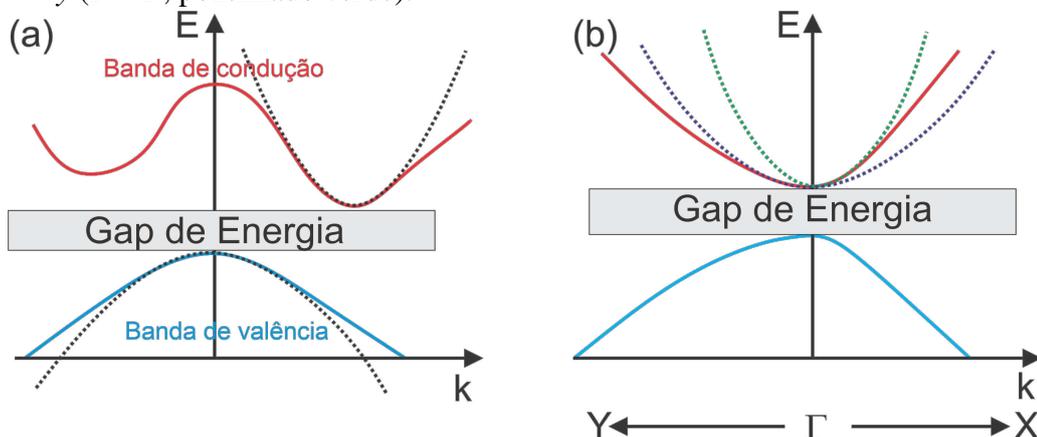
de $2 \cdot 10^{11} / \text{cm}^2$ à $2 \cdot 10^{12} / \text{cm}^2$ e pode ser esgotada aplicando uma voltagem entre os terminais. Uma importância prática dessa estrutura reside em seu uso como transistor de efeito de campo.

Motivado pelo formato do potencial linear nas heterojunções entre semicondutores com *bandgaps* diferentes, iremos apresentar no Capítulo 3 resultados para o transporte eletrônico em semicondutores isotrópicos e anisotrópicos considerando a aplicação de um potencial linear, típico potencial interfacial entre materiais semicondutores.

1.5 Semicondutores Isotrópicos *versus* Semicondutores Anisotrópicos

Até o momento discutimos sobre os semicondutores em geral, mas ainda não nos aprofundamos na diferença entre um semicondutor isotrópico e um semicondutor anisotrópico, como é o caso de alguns TMD's e do fosforeno, respectivamente. A natureza dessa diferença é uma consequência direta da estrutura de bandas dos materiais. Para entendermos esse comportamento nos semicondutores, vamos primeiramente entender a diferença entre anisotropia e isotropia. As propriedades de um sistema podem variar de acordo com a direção do espaço considerado, dando origem a direções privilegiadas. Em contraposição com a isotropia, que indica a independência direcional, essa dependência das grandezas físicas com a orientação espacial é chamada de anisotropia. A isotropia está intimamente relacionada com as propriedades de conservação de um sistema físico. Se dissermos que o espaço é isotrópico, estaremos afirmando

Figura 7 – (a) Estrutura de bandas de um semicondutor qualquer, destacando as bandas de condução (vermelho) e valência (azul). O fundo da banda de condução e o topo da banda de valência são aproximados por relações de dispersões parabólicas. (b) Ilustração de estrutura de bandas de um semicondutor anisotrópico, sendo aproximado via método da massa efetiva por parábolas com diferentes concavidades ao longo das diferentes direções: uma para a direção x ($\Gamma - X$, pontilhado azul) e uma para direção y ($\Gamma - Y$, pontilhado verde).



Fonte: Elaborado pelo autor

que a escolha arbitrária do eixo coordenado não influencia nas propriedades físicas do sistema, portanto a sua lagrangeana torna-se invariante sob rotações e consequentemente o momento angular deve ser conservado (MARION e THORNTON, 2004).

Podemos ver o aparecimento da anisotropia em várias propriedades, tais como na própria massa dos elétrons (Chen *et al.*; Chen *et al.*, 1996, 2010), nas propriedades de transporte eletrônico (Morrison e Myronov; Cheng e He, 2017, 2016) e na estrutura de bandas (Losovyj *et al.*, 2008). Ainda podemos ressaltar que existem materiais cujas propriedades anisotrópicas e isotrópicas coexistem, dependendo apenas das propriedades do corpo que estamos tratando, como por exemplo os quasicristais (Gong *et al.*, 2006). Ainda podemos citar alguns outros materiais que também apresentam propriedades anisotrópicas, tais como o óxido de gálio e nanopartículas de ouro (Au) que apresentam respectivamente anisotropia na sua condutividade dependendo da direção que estamos considerando e a chamada anisotropia magnética, tendo uma direção privilegiada para a magnetização espontânea (Gong *et al.*; Shih e Wu, 2006, 2010).

Uma propriedade bastante importante e que nos ajuda a entender a diferença entre semicondutores isotrópicos e anisotrópicos é o comportamento da sua estrutura de bandas que pode refletir diretamente no comportamento dos portadores de cargas, assim como sua massa. Podemos entender esse comportamento estudando o conceito de massa efetiva que consiste basicamente em aproximar as bandas de energias por uma parábola, como apresentado na Fig. 7(a). Isso nos permite determinar o valor da massa efetiva (Rezende, 2004)(Harrison e Valavanis, 2005), dada por

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}, \quad (1.1)$$

que está relacionada com o inverso da curvatura da banda ajustada pela parábola.

Da mesma maneira, podemos utilizar a expressão (1.1) para obter as massas efetivas ao longo das diferentes direções para um sistema cuja a estrutura de bandas é anisotrópica, que apresenta concavidades diferentes nas direções diferentes. Esse é o caso do fosforeno, como pode ser visto na Fig. 5(c) e ilustrado na Fig. 7(b), em que uma forte anisotropia é observada ao longo das direções *armchair* e *zigzag*. Assim, ajustando duas parábolas, uma para cada direção, podemos obter as duas massas efetivas, uma para a direção *armchair* e uma para a *zigzag*.

Assim, a assinatura do comportamento anisotrópico das bandas de energia de um determinado material resulta em massas efetivas distintas, assim como velocidades de grupo

dependentes das direções e, conseqüentemente, espera-se que várias outras propriedades físicas sejam influenciadas pela escolha da direção cristalográfica.

1.6 Escopo da Dissertação

Em geral, nosso objetivo com este trabalho é aprender diferentes métodos teóricos e computacionais que possibilite estudar as propriedades de transporte eletrônico de sistemas de baixa dimensionalidade. Para isso iniciaremos o nosso estudo no Capítulo 2, apresentando primeiramente alguns conceitos fundamentais do transporte mesoscópicos, assim como a diferença entre os condutores degenerados e não degenerado, os modos transversais, a ideia de transporte balístico, juntamente com as definições dos comprimentos característicos (livre caminho médio e o comprimento de relaxação de fase). Posteriormente obteremos a fórmula de Landauer, especificando o seu escopo e o motivo da generalização com a fórmula de Büttiker. No final do capítulo, iremos considerar os casos de dispositivos com dois, três e quatro terminais.

No Capítulo 3, tratamos do método da matriz de transferência. No decorrer do capítulo, nós apresentamos o conceito da matriz de transferência e espalhamento, estabelecendo uma relação entre ambas, além de discutir algumas propriedades que podem ser utilizadas para reduzir o número de variáveis tratadas durante a solução de um determinado problema, usando a conservação da densidade de corrente e simetria de conservação de reversão temporal. Mais adiante no capítulo, apresentaremos a interpretação física dos elementos da matriz de espalhamento, como a amplitude de transmissão e reflexão, algumas propriedades da matriz de transferência, e abordaremos a situação do uso do método para múltiplas regiões de espalhamento. Em seguida, mostraremos como obter os estados propagantes e estados ligados, além de apresentar a aplicação do método para o caso de múltiplas barreiras de potencial idênticas, utilizando a identidade de Chebyshev. No final do capítulo, utilizaremos o método da matriz transferência para estudar o transporte eletrônico para dois diferentes perfis de potenciais em sistemas semicondutores isotrópicos e anisotrópicos: barreiras de potenciais quadradas e lineares. Uma abordagem genérica, para uma região com um potencial com formato qualquer é considerado, e utilizando essa abordagem escrevemos um código computacional para obter os coeficientes de transmissão em função dos parâmetros do sistemas. Além disso, resolvemos analiticamente o caso da junção p-n, com interfaces abruptas e lineares. Os sistemas em estudo são investigados com a orientação arbitrária com relação a direção cristalográfica do semicondutor bidimensional.

No Capítulo 4, apresentamos o método da função de Green no equilíbrio. Inicialmente,

apresentamos a definição de função de Green, a equação de Dyson, juntamente com o método recursivo. Discutimos alguns exemplos através do método recursivo por decimação para os casos de cadeias lineares com um, dois e três sítios, e cadeias infinitas e semi-infinitas. Posteriormente, expandimos o método de decimação para os casos de cadeias escadas e redes bidimensionais. Nessa perspectiva, estendemos as discussões para uma rede quadrada e para as redes cristalinas do grafeno e fosforeno, que podem ser vistas como redes de tijolos isotrópico e anisotrópico, respectivamente. Em ambos os casos de cadeias lineares e redes bidimensionais, apresentaremos discussões sobre o cálculo de propriedades eletrônicas, como densidade de estados, densidades de estados locais e função espectral, além de propriedades de transporte, como transmissão.

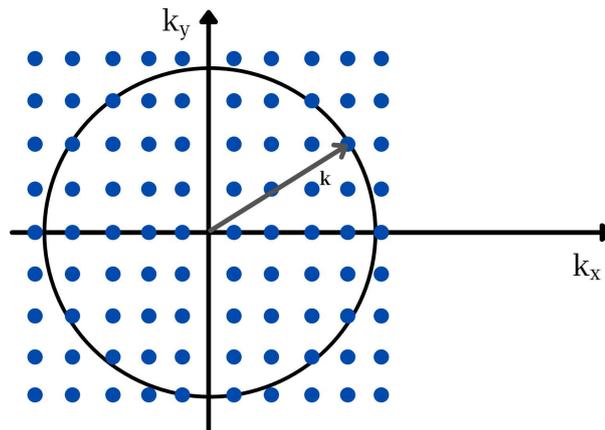
2 TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

Ao longo do presente capítulo, abordaremos conceitos básicos relacionados com o transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos, que serão a base para o entendimento das propriedades que serão calculadas e discutidas nos capítulos seguintes.

2.1 Condutor degenerado e não degenerado

Aqui abordaremos o conceito de condutores que estão no limite degenerado e não degenerado, com este intuito vamos introduzir a ideia de densidade de estados e determinar o número total de estados ocupados N_T , a partir do qual seremos capazes de determinar a densidade de elétrons n_s . Para isso, primeiramente consideraremos que o espaço seja bidimensional, então para cada energia vamos ter $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, como representado na Fig. 8.

Figura 8 – Representação dos estados k do sistema, assumindo uma condição periódica.



Fonte: Elaborado pelo autor

Assumindo que o condutor apresenta as condições de contorno periódicas, e tem dimensões grandes o suficiente dadas por L_x e L_y , temos que os estados apresentam espaçamento com o inverso do comprimento do condutor em suas respectivas direções x e y dadas por

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad (2.1a)$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}. \quad (2.1b)$$

A área do plano dos estados ocupados por $\frac{4\pi^2}{S}$, onde S é a área do condutor e a área do círculo na Fig. 8 é dado por πk^2 , em que o número total de estados, para os dois spins, é dado por

$$N_T = \frac{\pi k^2}{\frac{4\pi}{S}} = \frac{mS}{\pi\hbar^2} (E - E_s). \quad (2.2)$$

Observe que foi utilizado a energia do gás de elétron bidimensional, onde $E_s = E_c + \varepsilon_1$, sendo E_c a energia de condução e ε_1 o nível mais baixo das sub-bandas do gás de elétrons bidimensional, onde a energia total deve ser dada por

$$E = E_s + \frac{\hbar^2}{2m}k^2. \quad (2.3)$$

O segundo termo é obtido, porque os elétrons são livres no interior de um gás de elétron bidimensional.

O nosso objetivo é determinar a densidade de estados por unidade de área e energia, tal como

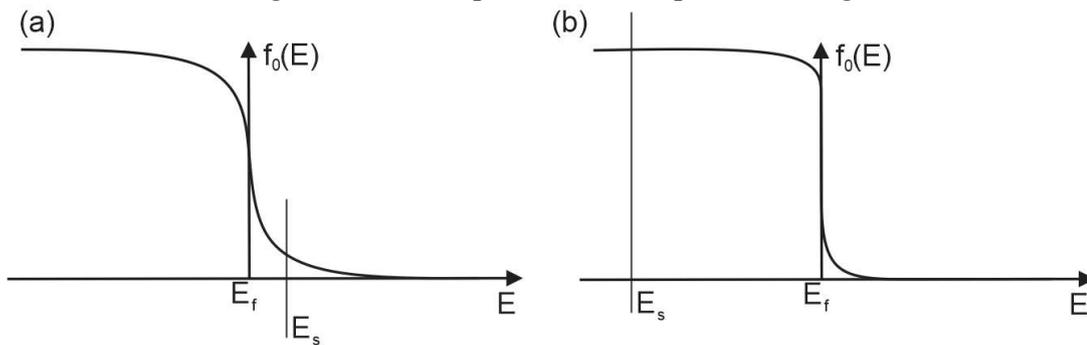
$$N(E) = \frac{1}{S} \frac{d}{dE} N_T(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_s), \quad (2.4)$$

onde θ é a função degrau. Para continuar, devemos nos lembrar que cada elétron tem uma probabilidade de ocupar um determinado estado, onde a equação que descreve essa distribuição é conhecida como função de Fermi (Datta, 1997)

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_f)/k_B T}}, \quad (2.5)$$

onde E_f é a energia de Fermi. Na Fig. 9 podemos observar os limites da Eq. (2.5) na qual para

Figura 9 – Representação da função de Fermi no interior da banda no (a) caso para altas temperaturas (não degenerado) e (b) para baixas temperaturas (degenerado).



Fonte: Elaborado pelo autor

altas temperaturas temos o limite não degenerado, cuja exponencial é muito maior que 1 e a função de Fermi torna-se aproximadamente

$$f_0(E) = e^{(E-E_f)/k_B T}. \quad (2.6)$$

Para baixas temperaturas, a exponencial torna-se muito menor que 1 no limite degenerado, tal como mostra a Fig. 9b em que a função de Fermi torna-se uma função degrau

$$f_0(E) = \theta(E_f - E). \quad (2.7)$$

Sabendo a densidade de estados N e a função de Fermi, devemos ser capazes de determinar a densidade de elétrons n_s escrita como

$$n_s = \int N(E) f_0(E) dE. \quad (2.8)$$

Usando o limite degenerado, tem-se que n_s fica

$$n_s = \frac{m}{\pi \hbar^2} \int \theta(E - E_s) \theta(E_f - E) dE = N_s (E_f - E_s), \quad (2.9)$$

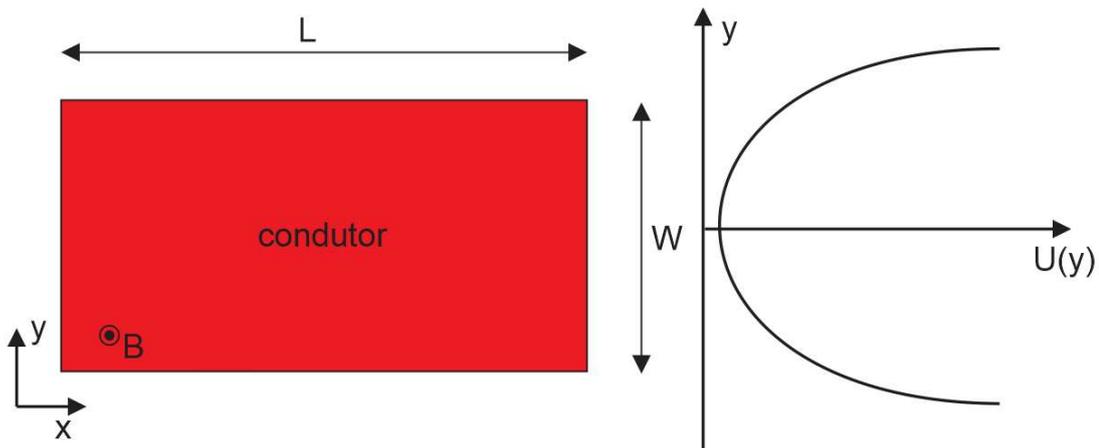
onde $N_s = \frac{m}{\pi \hbar^2}$.

2.2 Modos Transversais

Na presente seção iremos discutir a existência de modos transversais, verificando o comportamento das funções transversais, sub-bandas, e a forma de propagação das funções de onda, de maneira tal que possamos entender os estados dos elétrons no interior de um condutor sujeito a um campo elétrico e/ou magnético.

Na Fig. 10 abaixo observa-se um condutor sujeito a um potencial do tipo transversal, ou seja, existe um potencial que muda de intensidade quando a partícula se movimenta na direção transversal y do condutor, mas não possui esse comportamento na direção x , podendo se movimentar livremente neste sentido.

Figura 10 – Condutor retangular com direção x uniforme e potencial transversal $U(y)$.



Fonte: Elaborado pelo autor

Estando a partícula livre na direção x , a função de onda que a descreve deve ser dada por uma onda plana do tipo e^{ikx} . Utilizando separação de variáveis, podemos escrever que a função de onda para ambas as direções é dada por

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \chi(y), \quad (2.10)$$

que é solução da seguinte equação de Schrödinger

$$\left[E_s + \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (2.11)$$

onde E_s é a energia do fundo da sub-banda de energia. Observe que estamos assumindo que existe um campo magnético na direção z , entrando perpendicularmente no condutor, cujo potencial vetor é $\mathbf{A} = By\hat{x}$, de forma que podemos escrever a equação de Schrödinger considerando apenas a direção transversal

$$\left[E_s + \frac{(\hbar k + e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + U(y) \right] \chi(y) = E\chi(y). \quad (2.12)$$

Aqui discutiremos três casos na solução da equação acima. O primeiro caso é para $U(y) \neq 0$ e $B = 0$. Nesta primeira situação, vamos considerar o tipo de potencial como sendo do tipo parabólico

$$U(y) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2. \quad (2.13)$$

Aplicando essas informações na equação de Schrödinger

$$\left[E_s + \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2 \right] \chi(y) = E\chi(y), \quad (2.14)$$

usando $p_y = i\hbar\partial/\partial y$ e organizando os termos, temos que

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2m(E - E_s)}{\hbar^2} - \frac{k^2}{\hbar} - \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2} y^2 \right] \chi(y) = 0, \quad (2.15)$$

o que resulta em

$$\frac{\partial^2 \chi(y)}{\partial \xi^2} + (\lambda - \xi^2) \chi(y) = 0, \quad (2.16)$$

onde definimos

$$\lambda = \frac{2m^2\omega(E - E_s)}{\hbar^3} - \frac{m\omega k^2}{\hbar^2}, \quad (2.17)$$

e

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} y. \quad (2.18)$$

A solução da Eq. (2.16) possui a forma dos polinômios de Hermite $H_n(\xi)$, dados por

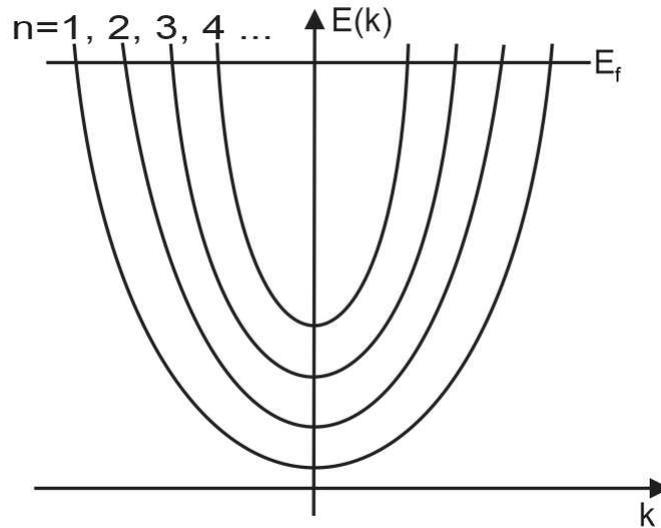
$$\chi(y) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi). \quad (2.19)$$

O autovalores são dados por

$$E(n, k) = E_s + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.20)$$

Note que esta equação nos dá as sub-bandas de energia do sistema, ou os comumente chamados modos transversais, onde para cada modo existe vários estados k possíveis, como apresentado na Fig. 11. Veja que o espaçamento entre duas sub-bandas é $\hbar \omega_0$. É importante

Figura 11 – Relação de dispersão para n níveis de energias para um sistema sujeito a um potencial transversal parabólico.



Fonte: Elaborado pelo autor

destacar que o confinamento na direção z é muito forte e o espaçamento das sub-bandas é muito grande, fazendo com que apenas a primeira sub-banda seja ocupada, diferentemente do espaçamento das sub-bandas na direção y que são menos espaçadas e tem muito mais bandas ocupadas.

Da definição de velocidade de grupo, obtêm-se que

$$v(n, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k)}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m}, \quad (2.21)$$

mostrando que a velocidade de grupo está na mesma direção do número de onda e independe da sub-banda que estamos considerando.

O segundo caso a ser analisado corresponde a situação em que o potencial $U(y) = 0$ e $B \neq 0$. A equação de Schrödinger fica

$$\left[E_s + \frac{(\hbar k + eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} \right] \chi(y) = E \chi, \quad (2.22)$$

onde

$$\left[E_s + \frac{(\hbar k + eBy)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(y + y_k)^2 \right] \chi(y) = E\chi(y), \quad (2.23)$$

definindo

$$y_k = \frac{\hbar k}{eB}, \quad (2.24)$$

e

$$\omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (2.25)$$

Fazendo o mesmo procedimento anterior, e definidos

$$\lambda = \frac{2m^2\omega(E - E_s)}{\hbar^3}, \quad (2.26a)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}y, \quad (2.26b)$$

$$\xi_k = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}y_k, \quad (2.26c)$$

onde utilizamos uma mudança de variável $\xi_T = \xi + \xi_k$ na equação de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \chi(y)}{\partial \xi_T^2} + (\lambda - \xi_T^2) \chi(y) = 0, \quad (2.27)$$

cuja solução deve ser do tipo

$$\chi(y) = e^{-(\xi + \xi_k)^2/2} H_n(\xi + \xi_k), \quad (2.28)$$

onde

$$E(n, k) = E_s + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.29)$$

É interessante notar que esta equação descreve os níveis de energia independente do estado k , ou seja, as sub-bandas de energia devem ser dadas como retas paralelas com espaçamento $\hbar\omega_c$, e ainda podemos determinar que a velocidade de grupo

$$v(n, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k)}{\partial k} = 0. \quad (2.30)$$

Podemos entender esse comportamento se associarmos ao modelo clássico, onde um elétron sujeito a um campo magnético se movimenta em um círculo, ou seja, os elétrons estão se movimentando, mas não estão se propagando como uma corrente de elétrons, por este motivo a velocidade de grupo é nula.

Agora da equação obtida da função de onda, podemos notar que ela depende diretamente do número de onda k , ou seja, para cada estado do elétron existe uma função de onda correspondente. Em geral, estamos dizendo que a função de onda difere ao longo da direção y do nosso condutor.

Para finalizar iremos verificar o caso onde $U(y)$ e B são diferentes de zero concomitantemente. Isso consiste no caso mais geral possível

$$\left[E_s + \frac{(\hbar k + eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2 \right] \chi(y) = E\chi(y). \quad (2.31)$$

Fazendo algumas manipulações

$$\left(E_s + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m \frac{\omega_0^2 \omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k^2 + \frac{1}{2}m\omega_{c0}^2 \left[y + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k \right]^2 \right) \chi(y) = E\chi(y), \quad (2.32)$$

definindo novamente

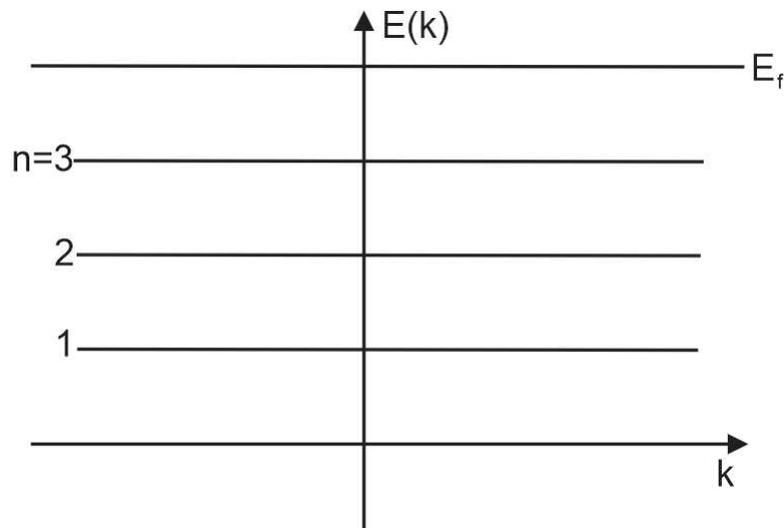
$$\lambda = \frac{2m^2 \omega_{c0}(E - E_s)}{\hbar^3} - m^4 \omega_0^2 \omega_c^2 y_k^2, \quad (2.33)$$

e

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_{c0}}{\hbar}} y, \quad (2.34)$$

$$\xi_k = \sqrt{\frac{m\omega_{c0}}{\hbar}} y_k, \quad (2.35)$$

Figura 12 – Relação de dispersão para um sistema sem campo elétrico e com campo magnético na direção z .



Fonte: Elaborado pelo autor

onde fazemos a mudança de variável $\xi_T = \xi + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} \xi$, encontramos

$$\frac{\partial^2 \chi(y)}{\partial \xi_T^2} + (\lambda - \xi_T^2) \chi(y) = 0, \quad (2.36)$$

cujas soluções são

$$\chi(y) = e^{-\left(\xi + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} \xi_k\right)^2 / 2} H_n\left(\xi + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} \xi_k\right), \quad (2.37)$$

onde

$$E(n, k) = E_s + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} \hbar \omega_c. \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.38)$$

Essa relação de dispersão é quase a mesma para o caso sem campo magnético, estando diferente somente pelo termo fracionário das frequências angulares e pela própria frequência angular ser diferente. Isso tudo faz com que a relação de dispersão tenha parábolas mais abertas e com níveis espaçados $\hbar \omega_{c0}$, onde a velocidade pode ser dada por

$$v(n, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k)}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2}. \quad (2.39)$$

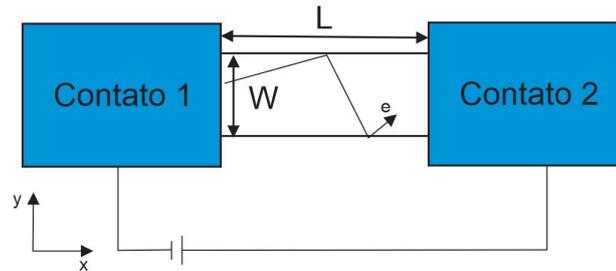
Podemos notar um comportamento semelhante ao caso com campo magnético igual a zero, em que somos capazes de afirmar que para k positivo o elétron se propaga para direita e para k negativo a propagação é para esquerda. Isto é, somos capazes de diferenciar os estados dos elétrons pela direção de propagação. Quanto à função de onda, temos o comportamento semelhante ao caso do potencial elétrico igual a zero, onde a posição y da partícula determina diferentes funções de onda, devido à dependência direta dos estados do elétron.

2.3 Transporte Balístico

Quando falamos de condutores macroscópicos e o transporte de elétrons nesses condutores, devemos levar em consideração a resistência causada pela existência de espalhamentos dentro do condutor, seja devido à impureza, fônons ou até mesmo por outros elétrons, ou seja, essas interações funcionam como uma barreira para dificultar a passagem de elétrons e influencia diretamente na resistência do condutor. Agora consideramos que o tamanho do condutor é menor que a média da distância entre cada centro espalhador, sendo esta média conhecida como o livre caminho médio l_m . De maneira mais exata o livre caminho médio é a maior distância que um elétron pode percorrer antes que o momento inicial seja completamente alterado como consequência do espalhamento. Os condutores que possuem comprimento menor

que este livre caminho médio são conhecidos como condutores balísticos. Dessa forma os condutores balísticos permitem a passagem de elétrons sem a existência de espalhamentos do tipo que falamos anteriormente, mas devemos salientar que as bordas do condutor funcionam como barreiras que permitem os elétrons serem refletidos, mas sem perder seu momento inicial completamente, como representado na Fig. 13.

Figura 13 – Representação do transporte balístico.



Fonte: Elaborado pelo autor

Além do livre caminho médio que especifica a condição de transporte balístico, existe também um outro comprimento útil que estabelece as condições para o transporte difusivo. Esse comprimento é chamado de comprimento de relaxação de fase l_ϕ , sendo definido como a maior distância percorrida pelo elétron até que sua fase inicial da função de onda seja alterada. O transporte difusivo ocorre quando o dispositivo tem comprimento maior que o livre caminho médio e menor que o comprimento de relaxação de fase.

Ainda é interessante resaltar que o livre caminho médio está diretamente ligado a resistência do condutor, uma vez que o seu valor deve diretamente está associado ao número de centros de espalhadores no dispositivo. Agora uma questão importante é: Existe resistência nos condutores balísticos? Em geral, para respondermos isso, devemos lembrar que em um condutor macroscópico, a condutância é inversamente proporcional ao comprimento do condutor

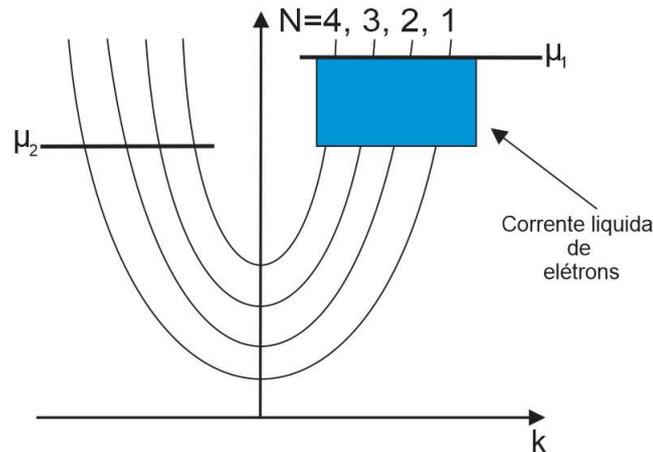
$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2.40)$$

logo se fizermos o valor de L reduzir indefinidamente, notaremos que a condutividade vai para o infinito e a resistência $R = 1/G$ vai para zero, isso deveria mostrar que quando L fosse menor que l_m o transporte seria sem resistência, mas experimentalmente é mostrado que o comportamento da condutividade tende para um limite G_C quando $L < l_m$. Isso mostra que o método convencional do estudo de transporte não é mais válido para esses dispositivos, o formalismo mais utilizado para resolver problemas nesse tipo de escala é chamado de formalismo de Landauer.

Agora uma questão importante que pode ser resolvida é de onde vem essa resistência. Essa resistência surge devido aos contatos, que são bastante diferentes do condutor. Por isso chamaremos essa resistência de resistência de contato G_C^{-1} (Datta, 1997)(Imry, 1986). Em geral ocorre devido a diferença de modos transversais entre os contatos e o condutor, uma vez que o número de modos transversais deve ser muito maior nos contatos para que sua condutância seja extremamente alta.

Para calcularmos a resistência de contato, primeiramente iremos considerar que os contatos são sem reflexão, ou seja, consideramos que a energia do elétron no condutor não esteja muito perto da parte inferior da banda, um elétron pode sair de um condutor estreito para um contato amplo com probabilidade insignificante de reflexão (Datta, 1997)(Szafer e Stone, 1989). Na Fig. 14, estamos vendo os estados do condutor balístico sem reflexão para cada modo

Figura 14 – Relação de dispersão para o condutor balístico, considerando contatos sem reflexão (Datta, 1997).



Fonte: Elaborado pelo autor

transversal, em que existe uma relação de dispersão $E(N, k)$ para cada estado e modos transversais, onde a energia de corte deve ser $\epsilon_N = E(N, 0)$. Dessa forma se considerarmos uma determinada energia E , para acharmos o número de modos transversais dentro desta energia, devemos saber quantas energias de corte cabem dentro dessa energia E . Para isso, devemos fazer

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \epsilon_N), \quad (2.41)$$

sendo $\theta(E - \epsilon_N)$ uma função degrau que para $E > \epsilon_N$ vai sempre resultar em um, e $E < \epsilon_N$ em zero.

Se considerarmos um gás de elétrons uniforme, notaremos que a corrente elétrica deve ser env , sendo n a densidade de elétrons e v a velocidade. Agora no nosso caso, a densidade

de elétrons para um estado k é dada pelo inverso do comprimento do condutor e a velocidade considerada deve ser a velocidade de grupo

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}. \quad (2.42)$$

Também devemos entender que $f(E)$ descreve a ocupação dos estados k . Então podemos construir a corrente da esquerda para a direita como

$$I = \frac{e}{L\hbar} \sum_k \frac{\partial E}{\partial k} f(E). \quad (2.43)$$

Trocando a soma em k por uma integral e considerando os dois *spins*

$$I = \frac{e}{h} \int_{\epsilon}^{+\infty} f(E) dE. \quad (2.44)$$

Essa integral calcula a corrente para um único modo transversal, agora para deixá-la de uma maneira mais geral devemos fazer

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\epsilon}^{+\infty} M(E) f(E) dE. \quad (2.45)$$

Portanto se considerarmos um caso particular em que M é constante sobre um intervalo de energia $\mu_1 < E < \mu_2$, então

$$I = \frac{2e^2}{h} M \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{e} = G_C \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{e}, \quad (2.46)$$

onde

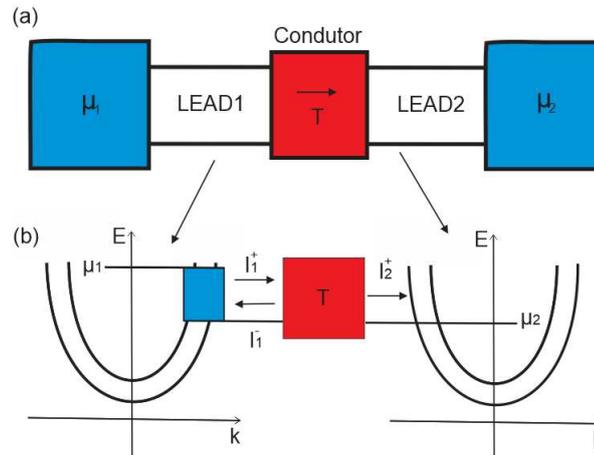
$$R_c = G_c^{-1} = \frac{\hbar}{2e^2 M}, \quad (2.47)$$

sendo $h/2e^2 \approx 12,9k\Omega$ e sabendo que em um problema real M é muito grande, então a resistência de contato é muito pequena.

2.4 Fórmula de Landauer

Na seção anterior estudamos o conceito de condutores balísticos e a existência de uma resistência de contato que não depende do comprimento do condutor e nem de sua largura, ou seja, não depende das suas dimensões, mas depende do número de modos transversais na Eq. (2.47). Nosso objetivo agora é estabelecer uma fórmula que incorpore de forma geral essas afirmações, através da conhecida fórmula de Landauer. Em geral essa fórmula nos permite calcular a condutância de condutores balísticos com a probabilidade de espalhamento devido aos elétrons que percorrem os condutores.

Figura 15 – Representação esquemática de uma transmissão T através de dois *Leads* conectados a um condutores em um sistema com temperatura igual a zero.



Fonte: Elaborado pelo autor

Na Fig. 15 somos capazes de ver um sistema com os *Leads* 1 e 2 conectados aos contatos 1 e 2 de forma que consideramos as correntes de incidência, reflexão e transmissão entre os *Leads* para determinar a transmissão. Nosso objetivo é relacionar de forma geral essa transmissão e a condutância para achar a fórmula de Landauer.

Antes disso devemos entender um importante resultado que ocorre devido a considerarmos os contatos como sendo sem reflexões. Primeiramente entendemos que ao fazermos esta afirmação, estamos dizendo que os elétrons que fluem do contato direito nunca irão ser ocupados pelos estados $+k$ no *Lead* 1, uma vez que os elétrons que estão saindo do contato esquerdo estão sendo ocupados pelo estado $-k$ no *Lead* 1 e posteriormente despejados no contato 1 sem que ocorra uma quantidade muito relevante de reflexão ao se chocarem com o contato esquerdo, impossibilitando que estes elétrons voltem para o *Lead* 2. Consequentemente o número de elétrons no estado $-k$ no *Lead* 1 que entram no contato 1 é quase o mesmo, gerando um estado de equilíbrio entre o *Lead* e o contato. Da mesma forma, os elétrons que surgem do contato esquerdo irão povoar os estados $+k$ no *Lead* 2 e naturalmente serão despejados no contato 2 sem reflexão, fazendo também com que os *Leads* entrem em equilíbrio com o contato direito. Isso faz com que o nível de quasi-Fermi do *Lead* 2 para o estado $+k$ seja sempre μ_1 . O mesmo pode ser aplicado para os estados $-k$ no *Lead* 1, tendo seu nível quasi-Fermi igual a μ_2 .

Devemos ver que até o momento negligenciamos a existência de reflexão na passagem de um *Lead* para o outro, sendo as ondas de saída, mesmo sabendo que parte dos estados $-k$ e $+k$ irão ser povoados, não necessariamente precisamos conhecer a distribuição desses elétrons, precisamos apenas da distribuição de energia dos estados de entrada, como veremos mais

adiante. Devemos ressaltar ainda que os contatos sem reflexão permitem um fluxo de entrada dos *Lead* para os contatos quase que completamente sem reflexão, permitindo que entrem em um equilíbrio eletroquímico, conseqüentemente o *Lead* e o contato acabam sendo confundido com um único dispositivo e basicamente podemos negligenciar a existência dos contatos e calcular apenas a transmissão conseqüente da interação entre os *Lead*.

Para continuarmos nossa discussão e obtermos a fórmula de Landauer, primeiramente devemos considerar a Fig. 15, onde admitimos a região de transmissão (dispositivo) de uma forma arbitrária e assumimos que a temperatura é igual a zero. Ainda devemos observar que os elétrons vêm com energia μ_1 no *Lead* 1 e saem para o *Lead* 2 com μ_2 , portanto podemos obter a corrente de elétrons I_1^+ nesse intervalo de energia, considerando o número de modos constantes, pela Eq. (2.44) é dada por

$$I_1^+ = \frac{2e}{h}M(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.48)$$

quando o fluxo de elétrons passa de um *Lead* para o outro pelo dispositivo central, parte sofre reflexão e a outra parte é transmitida com transmissão T . Dessa forma o fluxo de elétrons conseqüente de I_1^+ deve ser a parte desta corrente transmitida

$$I_2^+ = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.49)$$

e naturalmente a parte da corrente que foi refletida no *Lead* 1 tem que ser o fluxo de entrada menos o transmitido

$$I_1^- = \frac{2e}{h}M(\mu_1 - \mu_2) - \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e}{h}M(1 - T)(\mu_1 - \mu_2). \quad (2.50)$$

Veja que a corrente líquida que percorre ambos os *Leads*, igualmente conseqüente do fluxo de entrada, deve ser

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.51)$$

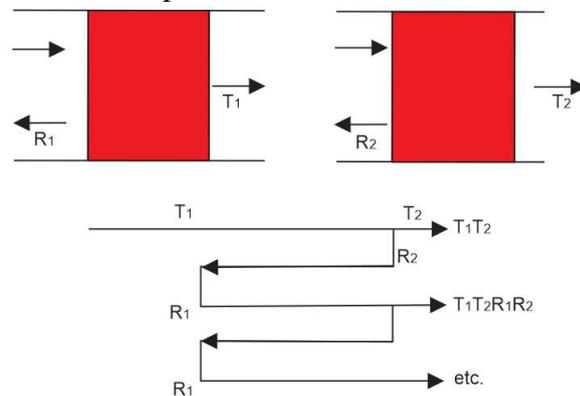
de forma que é conveniente definirmos a nossa condutância por

$$G = \frac{2e}{h}MT. \quad (2.52)$$

Este resultado conhecido como a fórmula de Landauer nos permite determinar as propriedades de transporte de um sistema mesoscópico simplesmente calculando as transmissões, resultando na capacidade de condução e resistência do dispositivo juntamente com a resistência do próprio contato, uma vez que podemos obter os resultados da seção anterior, na Eq.(2.47),

simplesmente considerando que $T = 1$. É ainda interessante perceber que a fórmula de Landauer nos dá um resultado que independe do comprimento e largura do dispositivo, diferente da lei de Ohm, dependendo apenas da transmissão e do número de modos transversais como havíamos falado anteriormente. Podemos encontrar uma forma de obtermos novamente a relação da lei de Ohm através da fórmula de Landauer, utilizando uma combinação de centros de espalhamento conectados em série, onde cada centro permite que uma parte da corrente do fluxo de entrada seja transmitida por uma transmissão T que é diferente para cada espalhamento como está sendo representado na Fig. 16(c).

Figura 16 – Sistema com dois centros de espalhamento conectados em série, onde cada espalhador tem transmissões e reflexões T_1 e R_1 , T_2 e R_2 sucessivamente para seus respectivos centros de espalhamento.



Fonte: Elaborado pelo autor

Veja que a transmissão resultante para o elétron passar do primeiro centro de espalhamento para o segundo não é simplesmente o produto das probabilidades de transmissão para cada espalhador, por que uma parte da onda que incide no segundo espalhador é transmitida por $T_1 T_2$. Naturalmente uma parte é refletida R_2 , e posteriormente será refletida novamente pelo primeiro espalhador R_1 , voltando para o segundo centro de espalhamento com uma segunda parcela transmitida dada por $T_1 T_2 R_1 R_2$ e sendo refletida outra vez, repetindo o ciclo anterior indefinidamente. A consequência disso é que a transmissão do elétron que passa pelo segundo centro de espalhamento tem que ser dada pela soma dessas parcelas que foram varias vezes transmitidas pelo segundo dispositivo

$$\begin{aligned}
 T_{12} &= T_1 T_2 + T_1 T_2 R_1 R_2 + T_1 T_2 R_1^2 R_2^2 + \dots \\
 &= T_1 T_2 (1 + R_1 R_2 + R_1^2 R_2^2 + \dots),
 \end{aligned}
 \tag{2.53}$$

note que o comportamento na parte com parênteses é uma progressão geométrica com razão $R_1 R_2$ sendo obviamente menor que 1 nestas condições, e admitindo que o centro espalhador N é

muito grande, a fórmula da progressão geométrica deve ser

$$S_N = \frac{a_1}{1 - q}, \quad (2.54)$$

sendo $a_N = 1$ o primeiro termo e $q = R_1 R_2$ a razão, então

$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2}. \quad (2.55)$$

Usando a propriedade de $R_1 = 1 - T_1$ e $R_2 = 1 - T_2$ podemos calcular

$$1 - R_1 R_2 = \frac{T_1 T_2}{T_{12}}, \quad (2.56a)$$

$$T_1 + T_2 - T_1 T_2 = \frac{T_1 T_2}{T_{12}}, \quad (2.56b)$$

$$T_1 + T_2 = T_1 T_2 \left[\frac{1 + T_{12}}{T_{12}} \right], \quad (2.56c)$$

$$\frac{T_1 + T_2}{T_1 T_2} - 2 = \frac{1 - T_{12}}{T_{12}}, \quad (2.56d)$$

$$\begin{aligned} \frac{1 - T_{12}}{T_{12}} &= \frac{T_1(1 - T_2) + T_2(1 - T_1)}{T_1 T_2} \\ &= \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}. \end{aligned} \quad (2.56e)$$

Então para cada centro de espalhamento temos um termo adicional dependendo da transmissão de cada espalhador. Portanto, se expandirmos este resultado para N centros de espalhamento, considerando que os espalhadores são idênticos, ganhamos a relação

$$\frac{1 - T(N)}{T(N)} = N \frac{1 - T}{T}, \quad (2.57)$$

onde

$$T(N) = \frac{T}{T + N(1 - T)}, \quad (2.58)$$

em que T é a transmissão para passar por um centro de espalhamento.

Para continuar a discussão devemos definir que L_0 é da ordem do livre caminho médio, ou seja, é basicamente a distância entre dois centros de espalhamento consecutivos. Se admitirmos que n é a densidade de centros de espalhamento por unidade de comprimento, iremos definir

$$L_0 = \frac{T}{n(1 - T)}. \quad (2.59)$$

Substituindo na Eq. (2.58), obtemos

$$\begin{aligned}
 T(N) &= \frac{T}{T + N(1 - T)} = \frac{T}{T + N\frac{T}{nL_0}} \\
 &= \frac{1}{1 + \frac{N}{nL_0}} = \frac{1}{1 + \frac{L}{L_0}} \\
 &= \frac{L_0}{L_0 + L},
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

onde $L = NL_0$.

Usando a equação do número de modos transversais

$$M = \frac{k_F W}{\pi}, \tag{2.61}$$

aplicando na Eq. (2.52)

$$G = \frac{2e^2 k_F W}{\hbar \pi} \frac{L_0}{L + L_0} = \frac{2\sigma}{\pi(L + L_0)} \tag{2.62}$$

calculando a resistência, encontramos

$$\begin{aligned}
 G^{-1} &= \frac{\pi}{2} \left(\frac{L}{\sigma W} + \frac{L_0}{\sigma W} \right) \\
 &= G_R^{-1} + G_C^{-1}
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

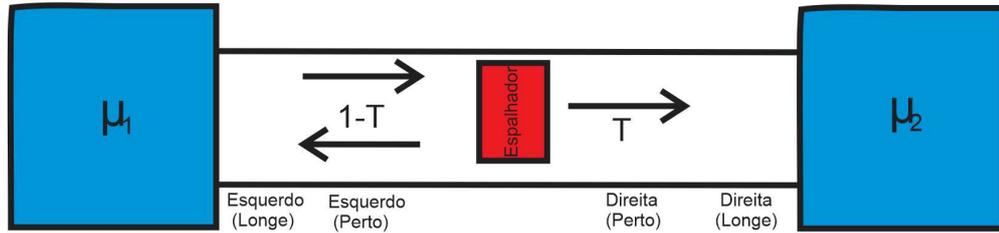
em que G_R^{-1} é a resistência real devido a interação dos *Lead* na região de espalhamento e G_C^{-1} é a resistência de contato.

Para finalizar, iremos mostrar que o comprimento L_0 está na mesma ordem do livre caminho médio L_m . Devemos ver que a probabilidade de espalhamento para um único centro de espalhamento é $1 - T$. Se considerarmos que $T \approx 1$ em um sistema de N centros espalhadores então $(1 - T)N \approx 1$ é a probabilidade de espalhamento para todos os espalhadores. Como o livre caminho médio é a maior distância que um elétron percorre antes de ser espalhado, então $L_m \approx 1/(1 - T)n \approx L_0$.

2.5 Portenciais Eletroquímicos e a Probe Voltagem

Nas seções anteriores já discutimos que os estados $-k$ e $+k$ estão em equilíbrio com os seus respectivos contatos 1 e 2, estando ambos com os potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 . O nosso objetivo é entender o comportamento espacial destes potenciais antes e depois do espalhamento nas proximidades da região de espalhamento e nas regiões mais distantes, como estamos representando na Fig. 17. Primeiramente devemos compreender que o número

Figura 17 – Sistema de espalhamento com transmissão T , separado em quatro regiões. Lado direito próximo ao espalhador e longe do espalhador, lado esquerdo próximo do espalhador e longe do espalhador.



Fonte: Elaborado pelo autor

de elétrons, seja eles nos estados $+k$ ou $-k$, devem ser conservados, independentemente da mudança de estados que eles possam sofrer devido ao espalhamento e conseqüentemente o número de estados devem ser conservado. Portanto o número de estados de incidência dos estados $+k$ tem que ser igual ao número de estados $+k$ transmitidos mais os estados $-k$ devido a reflexão dos estados $+k$ de incidência, isto é,

$$N_{in}^+ = N_T^+ + N_R^-, \quad (2.64)$$

onde N_{in}^+ e N_T^+ são números de estados $+k$ incidentes e transmitidos, e N_R^- são os estados $-k$ devido a reflexão, que podem ser escritos por

$$N_R^- = (1 - T)N_{in}^+, \quad (2.65a)$$

$$N_T^+ = TN_{in}^+. \quad (2.65b)$$

Lembrando que já definimos o número de estados e densidade de estados nas seções anteriores, podemos estabelecer a relação entre elas por

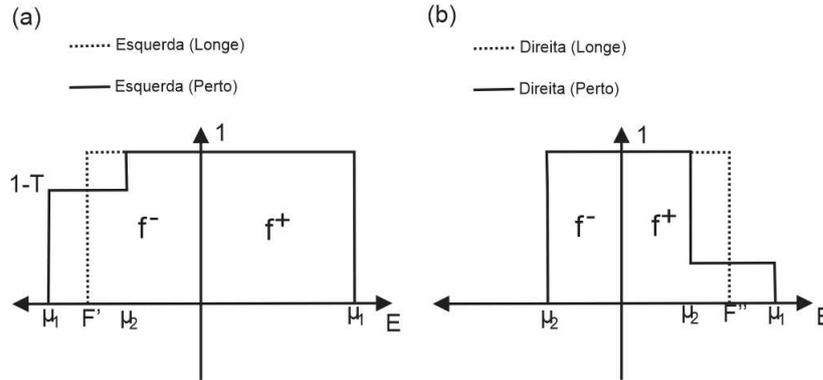
$$N_R^- = \int_{\mu_2}^{\mu'} D_R(E) dE, \quad (2.66a)$$

$$N_T^+ = \int_{\mu_2}^{\mu''} D_T(E) dE, \quad (2.66b)$$

$$N_{in}^+ = \int_{\mu_2}^{\mu_1} D_{in}(E) dE. \quad (2.66c)$$

Veja que definimos os potenciais químicos μ' e μ'' que são os potenciais para os *Lead* 1 e 2 respectivamente em uma região longe da região de espalhamento, Fig. 18. Fazemos isso, pois as regiões muito próximas do espalhador apresentam uma distribuição de energia fora de equilíbrio devido a mudança repentina nos estados, diferentemente de regiões mais distantes nas quais os elétrons irão se estabelecer em uma energia mais baixa permitindo uma distribuição mais equilibrada.

Figura 18 – Função de distribuição para os *Lead* 1 e 2 nas regiões mais distantes do espalhador.



Fonte: Elaborado pelo autor

Sabendo que as funções densidade de estados são dadas por

$$D(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \theta(E - \mu_2), \quad (2.67)$$

aplicando nas Eqs. (2.66b), (2.66a) e (2.66c) e depois usando o resultado nas Eqs. (2.65b) e (2.65a), temos que

$$\mu' = \mu_2 + (1 - T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.68a)$$

$$\mu'' = \mu_2 + T(\mu_1 - \mu_2). \quad (2.68b)$$

Note que μ' nos mostra que a distribuição de energia no lado esquerdo provém dos elétrons na região de energia mais baixa e os elétrons refletidos na região entre μ_1 e μ_2 são consequentes da corrente

$$f^- = \theta(\mu' - E), \quad (2.69)$$

enquanto que μ'' representa a distribuição de energia para os elétrons da região mais baixa e da parte transmitida no intervalo μ_1 e μ_2

$$f^+ = \theta(\mu'' - E). \quad (2.70)$$

Juntando todas as informações que já obtivemos, somos capazes de normalizar o nosso potencial eletroquímico, onde estabelecemos um intervalo de potencial igual ao da função transmissão, em que $\mu_1 = 1$ e $\mu_2 = 0$. De forma que ao usarmos as Eqs. (2.68a) e (2.68b) para $\mu_{direito}^+ = T$ e $\mu_{esquerdo}^- = 1 - T$, sendo os potenciais eletroquímicos normalizados para os estados $+k$ e $-k$ respectivamente, também devemos ter por definição que o potencial eletroquímico de $+k$ no lado esquerdo é $\mu_{esquerdo}^+$ e como não temos elétrons com estados $-k$ no lado direito $\mu_{direito}^- = 0$, como está sendo representado na Fig. 19. Podemos notar que a parte superior do

Figura 19 – Distribuição do potencial eletroquímico normalizado ao longo do espalhador.

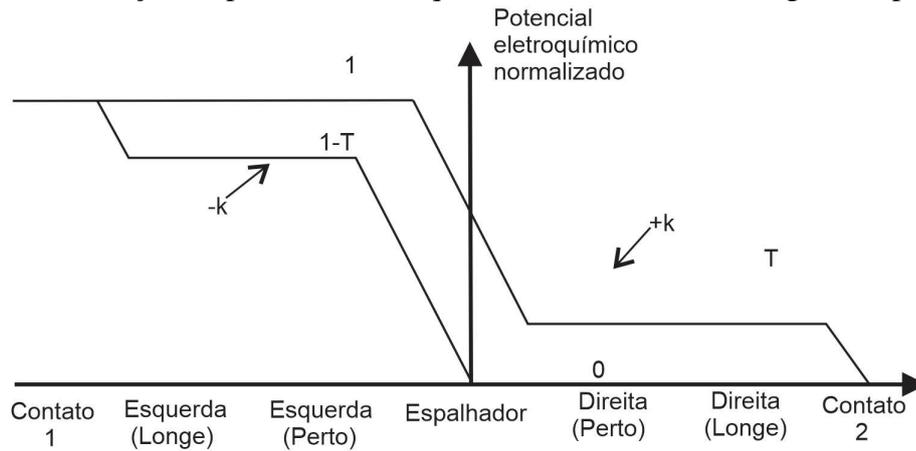
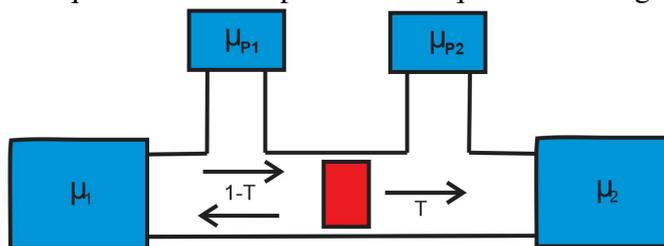


gráfico corresponde ao potencial eletroquímico normalizado para o estado $+k$ e a inferior ao estado $-k$, onde podemos usar a diferença de altura para determinar a queda de voltagem devido aos estados

$$eV = (1 - T)(\mu_1 - \mu_2). \quad (2.71)$$

Sabendo dessas informações, agora podemos entrar na discussão sobre voltagem de prova. Primeiramente devemos entender o conceito de ponte Hall de múltiplos terminais. A ideia é vermos que a corrente vai passar de um contato para outro, entretanto adicionamos outros terminais no meio do caminho, servindo como voltagem de prova, ou seja, funciona como um dispositivo que é capaz de determinar o potencial eletroquímico local, veja Fig. 20. Aqui

Figura 20 – Sistema com quatro terminais para medir a queda de voltagem no espalhador.



Fonte: Elaborado pelo autor

podemos dizer que a queda de voltagem que essas ferramentas devem medir tem que ser dada pela Eq. (2.71), onde a corrente é conhecida e a resistência para o sistema de quatro terminais deve ser

$$R_{4p} = \frac{(\mu_{P1} - \mu_{P2})/e}{I}, \quad (2.72)$$

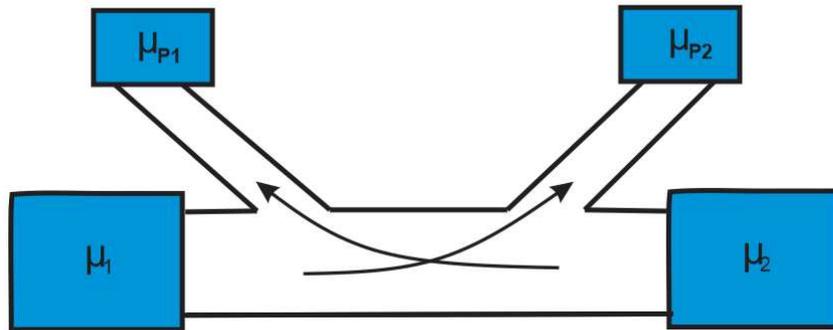
com os Probes sendo idênticos e $\mu_{P1} - \mu_{P2} = eV$, também usando a corrente definida anterior-

mente

$$R_{4p} = \frac{h}{2e^2M} \frac{1-T}{T}. \quad (2.73)$$

Agora se considerarmos um sistema em que os dispositivos de prova são diferentes como mostrado na Fig. 21, Eqs. (2.68a) e (2.68b) em que a voltagem de prova $P1$ apresenta uma

Figura 21 – Sistema com quatro terminais para medir a queda de voltagem no espalhador, onde os Probes são diferentes.



Fonte: Elaborado pelo autor

inclinação que permite a entrada de corrente devido ao espalhamento com muito mais facilidade vindos do *lead 2* e a voltagem de prova $P2$ com a corrente vindo do *lead 1*, como podemos ver representado na Fig. 21, sendo que se o dispositivo de prova $P1$ estiver trocado com o $P2$ iríamos ter uma passagem de corrente muito mais difícil. Isso mostra que a configuração dos dispositivos de prova na forma apresentado na Fig. 21 são mais adequados para os estados $-k$ e $+k$ para os dispositivos de prova $P1$ e $P2$ respectivamente, cujos potenciais eletroquímicos são dados por μ_{P1} e μ_{P2} , fazendo a resistência tornar-se

$$\begin{aligned} R_{4p} &= \frac{(\mu_{P1} - \mu_{P2})/e}{I} = \frac{h}{2e^2M} \frac{\mu' - \mu''}{T} \\ &= \frac{\hbar}{2e^2M} \frac{1-2T}{T}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Entretanto, um problema muito inconveniente surge na prática. É muito difícil controlar perfis de potencial eletroquímicos que acoplamentos dos Probes aos estados $+k$ e $-k$ (Datta, 1997). Se as sondas não apresentarem acoplamentos idênticos, fica muito difícil de prever o valor medido, estando entre os extremos

$$R_{4p} = \frac{h}{2e^2M} \frac{1}{T}, \quad (2.75a)$$

$$R_{4p} = \frac{h}{2e^2M} \frac{1-2T}{T}. \quad (2.75b)$$

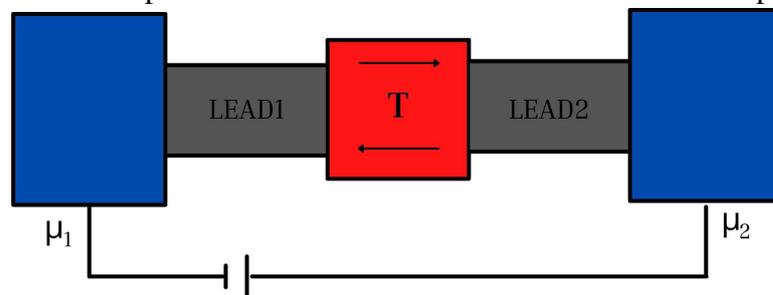
Outro ponto inconveniente na prática que acaba tornando o método de Landauer muito difícil de ser aplicado é em relação aos efeitos de interferência quântica para os dispositivos de prova com dimensão próxima ao tamanho de uma relaxação de fase, sendo o problema mesoscópico que estamos tratando. Para compreendermos isso melhor iremos considerar o caso em que a transmissão é muito próxima de zero. Nesse caso, a probabilidade de reflexão é muito grande e, conseqüentemente, o potencial eletroquímico é quase um no lado esquerdo, sendo esperado que os *probes* conseguissem um potencial eletroquímico igual a este valor. Entretanto, devido às ondas destrutivas que surgem na reflexão, o *probe* pode medir qualquer valor entre zero e um, onde o único momento que a sonda consegue fazer uma medida exata é no momento em que esses efeitos de interferência quântica não estiverem presentes.

2.6 Formula de Büttiker

2.6.1 Caso degenerado

Nosso objetivo nesta seção é estudar um caso mais geral da fórmula de Landauer que foi desenvolvida por Büttiker para contornar os problemas nas medidas da resistência para os quatro terminais. Nas seções da fórmula de Landauer, simplesmente consideramos o caso degenerado para apenas dois terminais, cuja corrente flui do terminal 1 para o 2, ver Fig. 22. Aqui iremos verificar o caso não degenerado em múltiplos terminais e depois o caso específico degenerado da fórmula de Büttiker para facilitar alguns usos, considerando que não existe diferença entre a corrente e a voltagem de prova.

Figura 22 – Sistema com espalhador ao considerar o fluxo de corrente de 1 para 2 e 2 para 1.



Fonte: Elaborado pelo autor

Para tornar um pouco mais geral podemos dizer que os *Leads* apresentam um número de modos M diferentes, e usando a definição de corrente deduzida nas seções anteriores, obtemos

$$I^+ = \frac{2e^2}{h} \int f^+ M(E) dE. \quad (2.76)$$

Definindo a parte interna da integral como

$$i_1^+ = \frac{2e^2}{h} f_1(E) M_1(E), \quad (2.77)$$

sendo a corrente de incidência que vem do *Lead 1* para o *Lead 2*, podemos fazer

$$i_2^- = \frac{2e^2}{h} f_2(E) M_2(E). \quad (2.78)$$

Portanto, o fluxo de corrente que percorre o *Lead 2* da esquerda para direita tem que ser a contribuição transmitida de $T_{12}i_1^+$ e a parte refletida $(1 - T_{21})i_2^-$, sendo que a transmissão da esquerda para a direita tem que ser diferente da direita para a esquerda

$$i_2^+ = T_{12}i_1^+ + (1 - T_{21})i_2^-. \quad (2.79)$$

Usando a mesma ideia, o fluxo de corrente no lado esquerdo tem que ser a parcela de corrente $(1 - T_{12})i_1^+$ com $T_{21}i_2^-$

$$i_1^- = T_{21}i_2^- + (1 - T_{12})i_1^+. \quad (2.80)$$

Definindo

$$\bar{T}_{pq} = M(E) T_{pq}, \quad (2.81)$$

sendo p e q o número dos terminais, então podemos determinar que o fluxo em ambos os *Leads* deve ser

$$\begin{aligned} i(E) &= i_1^+ - i_1^- = i_2^+ - i_2^- = T_{12}i_1^+ + (1 - T_{21})i_2^- - i_2^- \\ &= \frac{2e^2}{h} (\bar{T}_{12}f_1(E) + \bar{T}_{21}f_2^-(E)). \end{aligned} \quad (2.82)$$

Integrando o resultado sobre todas as energias, obtemos

$$I = \frac{2e^2}{h} \int (\bar{T}_{12}f_1(E) - \bar{T}_{21}f_2^-(E)) dE. \quad (2.83)$$

Note ainda que se admitirmos que os potenciais eletroquímicos são muito próximos, vamos ter uma corrente infinitesimal δI e uma variação da função de distribuição $\delta(f_1(E) - f_2(E))$, de maneira que podemos fazer

$$\delta(f_1(E) - f_2(E)) = \delta(\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f(E)}{\partial E}. \quad (2.84)$$

Se fizermos $\bar{T}_{12} = \bar{T}_{21}$, encontramos

$$I = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{12}(f_1(E) + f_2^-(E))dE, \quad (2.85)$$

e utilizando a definição de condutância, obtemos

$$G = \frac{\delta I_i}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = -\frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) \frac{\partial f}{\partial E} dE. \quad (2.86)$$

Essa resposta é conhecida como resposta linear. Veja que até o momento estávamos considerando apenas o caso para dois terminais, mas podemos simplesmente generalizar o sistema para múltiplos terminais, considerando que as voltagens são introduzidos como terminais, onde naturalmente o fluxo de corrente em cada terminal recebe as parcelas de correntes que vêm de todos os outros terminais, de forma que

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q (\bar{T}_{pq}f_p(E) - \bar{T}_{qp}f_q(E)), \quad (2.87)$$

onde

$$I_p = \int i_p(E)dE. \quad (2.88)$$

Se considerarmos que o sistema está em equilíbrio ou que apresenta espalhamento somente inelástico, podemos estabelecer a relação

$$\sum_q T_{pq} = \sum_q T_{qp}, \quad (2.89)$$

onde ao definirmos $V_p = \mu_p/e$, obtemos

$$I_p = \sum_q G_{pq}(V_p - V_q), \quad (2.90)$$

sendo conhecida como a Fórmula de Büttiker para o caso degenerado, onde

$$G_{pq} = -\frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq} \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE. \quad (2.91)$$

No caso para baixas temperaturas podemos ter

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}. \quad (2.92)$$

Dessa forma, conseguimos estabelecer o formalismo de Landauer-Büttiker que determina a corrente para múltiplos terminais, onde os dispositivos de prova são considerados parte do sistema de múltiplos terminais.

2.6.2 Três Terminais

Agora iremos determinar a resistência para o caso de três terminais e para quatro terminais que é exatamente onde a fórmula de Landauer apresentava problemas. Primeiramente vamos verificar para três terminais, onde vamos ter três correntes na Eq. (2.90)

$$\begin{aligned} I_1 &= G_{12}V_1 - G_{12}V_2 + G_{13}V_1 - G_{13}V_3 \\ &= (G_{12} + G_{13})V_1 - G_{12}V_2 - G_{13}V_3, \end{aligned} \quad (2.93a)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= G_{21}V_2 - G_{21}V_1 + G_{23}V_2 - G_{23}V_3 \\ &= -G_{21}V_1 + (G_{21} + G_{23})V_2 - G_{23}V_3, \end{aligned} \quad (2.93b)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= G_{31}V_3 - G_{31}V_1 + G_{32}V_3 - G_{32}V_2 \\ &= -G_{31}V_1 - G_{32}V_2 + (G_{31} + G_{32})V_3. \end{aligned} \quad (2.93c)$$

Colocando na forma matricial,

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{31} & G_{21} + G_{23} & -G_{13} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}, \quad (2.94)$$

podemos estabelecer que $V_3 = 0$ sem perda de generalidade,

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} \\ -G_{31} & (G_{21} + G_{23}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}. \quad (2.95)$$

Podemos inverter as matrizes, ganhando as voltagens em termo da corrente através da chamada matriz de resistência

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix}. \quad (2.96)$$

Agora se considerarmos que estamos buscando determinar a voltagem para os três Probes, em que consideramos a corrente fluindo de 1 para 3, aplicando uma voltagem entre 2 e 3, como mostrado na Fig. 23

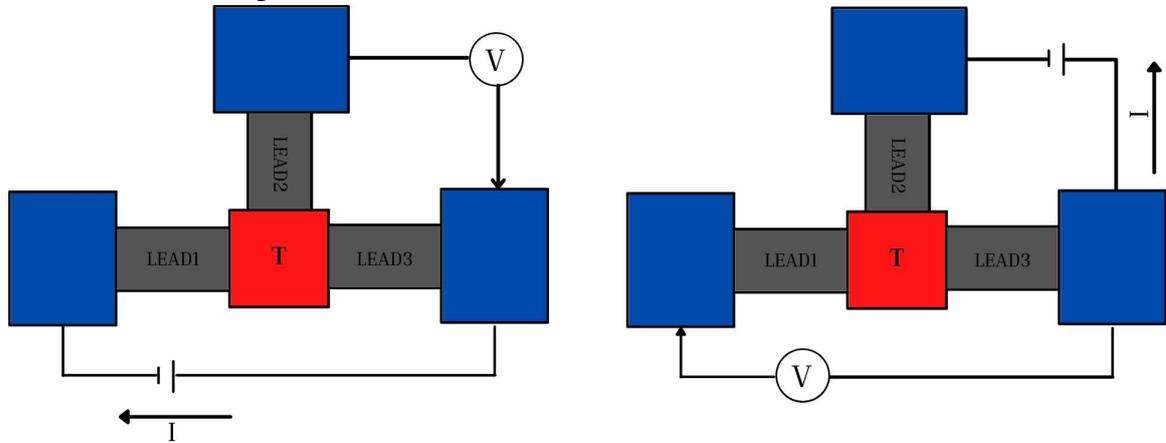
temos

$$R_{3p} = \left[\frac{V_2}{I_1} \right]_{I_2=0} = R_{21}. \quad (2.97)$$

Agora, para o caso da Fig. 23 estamos considerando a corrente do terminal 2 para o 3 e a voltagem entre os terminais 1 e 3, tal que a resistência é

$$R_{3p} = \left[\frac{V_1}{I_2} \right]_{I_2=0} = R_{12}. \quad (2.98)$$

Figura 23 – Representação considerando três terminais, onde apresentamos duas configurações distintas. O Lado esquerdo é para a resistência entre os LEADs 1 e 3, quanto ao lado direito, é para a resistência entre os LEADs 2 e 3.



Fonte: Elaborado pelo autor

Os valores R_{12} e R_{21} têm que ser determinados através da matriz de resistência ao inverter a matriz da condutância.

2.6.3 Quatro Terminais

Aqui iremos fazer o mesmo procedimento do caso anterior, onde consideramos mais duas configurações possíveis para o sistema de quatro terminais, como mostrado na Fig. 24, onde

$$\begin{aligned} I_1 &= G_{12}V_1 - G_{12}V_2 + G_{13}V_1 - G_{13}V_3 + G_{14}V_1 - G_{14}V_4 \\ &= (G_{12} + G_{13} + G_{14})V_1 - G_{12}V_2 - G_{13}V_3 - G_{14}V_4, \end{aligned} \quad (2.99a)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= G_{21}V_2 - G_{21}V_1 + G_{23}V_2 - G_{23}V_3 + G_{24}V_2 - G_{24}V_4 \\ &= -G_{21}V_1 + (G_{21} + G_{23} + G_{24})V_2 - G_{23}V_3 - G_{24}V_4, \end{aligned} \quad (2.99b)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= G_{31}V_3 - G_{31}V_1 + G_{32}V_3 - G_{32}V_2 + G_{34}V_3 - G_{34}V_4 \\ &= -G_{31}V_1 - G_{32}V_2 + (G_{31} + G_{32} + G_{34})V_3 - G_{34}V_4, \end{aligned} \quad (2.99c)$$

$$\begin{aligned} I_4 &= G_{41}V_4 - G_{41}V_1 + G_{42}V_4 - G_{42}V_2 + G_{43}V_4 - G_{43}V_3 \\ &= -G_{41}V_1 - G_{42}V_2 - G_{43}V_3 + (G_{41} + G_{42} + G_{43})V_4. \end{aligned} \quad (2.99d)$$

Na forma matricial fica

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} & -G_{14} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} & -G_{24} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} & -G_{34} \\ -G_{41} & -G_{42} & -G_{43} & G_{41} + G_{42} + G_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{pmatrix}. \quad (2.100)$$

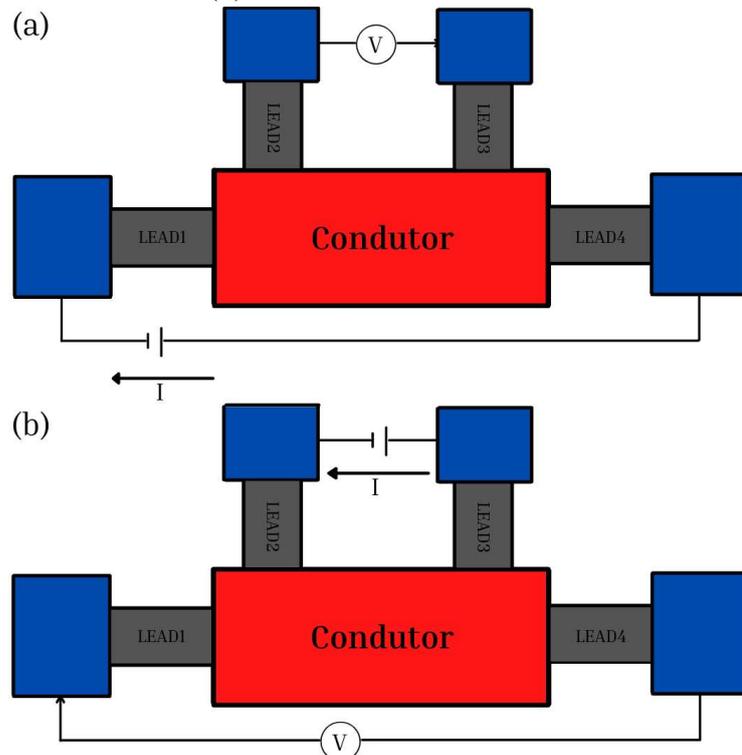
Considerando que $V_4 = 0$, devemos ter

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}. \quad (2.101)$$

Invertendo a matriz

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix}, \quad (2.102)$$

Figura 24 – Quatro terminais representados de duas formas distintas, das quais são, (a) resistência entre os *leads* 1 e 4 e (b) resistência entre os *leads* 2 e 3.



Fonte: Elaborado pelo autor

obtemos o valor da resistência para os quatro terminais,

$$R_{4p} = \frac{V}{I} = \left[\frac{V_2 - V_3}{I_1} \right]_{I_2=I_3=0} = \frac{R_{21}I_1 - R_{31}I_1}{I_1} = R_{21} - R_{31}. \quad (2.103)$$

No outro caso da Fig. 24, analogamente obtemos,

$$R_{4p} = \frac{V_1}{I_2} = R_{12} - R_{31}. \quad (2.104)$$

3 MATRIZ DE TRANSFERÊNCIAS E SUAS APLICAÇÕES

3.1 Matriz de transferência e espalhamento

A matriz de transferência consiste em um método que estabelece uma relação entre as amplitudes das ondas antes da região de espalhamento e depois da região de espalhamento. Podendo ser usado para analisar a propagação de onda da partícula quântica, ondas eletromagnéticas, ondas acústicas, ondas elásticas, dentre outras.

Esta seção buscará apresentar o método da matriz de transferência e de espalhamento. Na qual primeiramente iremos considerar um potencial unidimensional para encontrar a matriz de transferência M que estabelecerá a relação entre as amplitudes das ondas antes e depois do potencial. Através desta matriz, introduziremos a matriz de espalhamento S que apresenta a relação entre às amplitudes das ondas de saída (se afastando do potencial) com as de chegada (se aproximando do potencial), assim mostraremos a relação entre as matrizes S e M , apresentando algumas propriedades baseadas na invariância de reversão temporal e conservação da corrente. Posteriormente apresentaremos a transmissão e reflexão eletrônica através do formalismo da matriz de transferência para então estender o cálculo para N potenciais unidimensionais.

3.1.1 Potencial unidimensional

Agora iremos apresentar um problema simples de espalhamento de um elétron na presença de um potencial localizado. Para simplificar, iremos considerar a equação de Schrödinger para o caso unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (3.1)$$

e nós devemos assumir o seguinte potencial

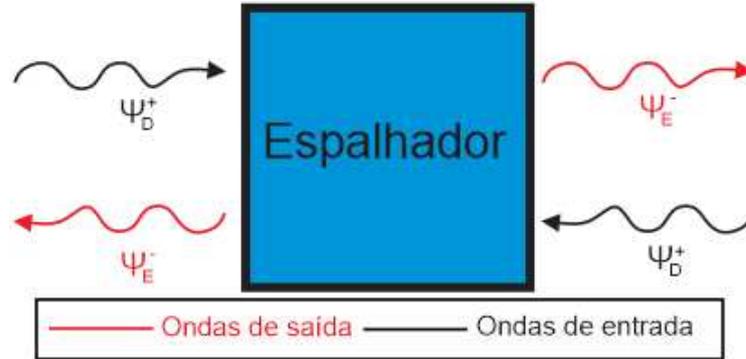
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } 0 < x < L, \\ 0 & \text{se } x < 0 \text{ e } x > L. \end{cases} \quad (3.2)$$

consideramos que a solução para a equação de Schrödinger fora do potencial é conhecida e dada pela superposição das ondas planas

$$\psi_E(x) = \psi_E^+(x) + \psi_E^-(x), \quad (3.3a)$$

$$\psi_D(x) = \psi_D^+(x) + \psi_D^-(x), \quad (3.3b)$$

Figura 25 – Relação das ondas de chegada e de saída para um sistema de potencial unidimensional qualquer.



Fonte: Elaborado pelo autor

onde ψ_E^+ e $\psi_D^-(x)$ são as ondas de chegada e ψ_E^- e $\psi_D^+(x)$ as de saída, representadas pela Fig. 25, em que devemos ter

$$\psi_E^+(x) = Ae^{+iqx} \quad , \quad \psi_E^-(x) = Be^{-iqx} \quad , \quad (3.4a)$$

$$\psi_D^+(x) = Ce^{+iqx} \quad , \quad \psi_D^-(x) = De^{-iqx} \quad , \quad (3.4b)$$

sendo \mathbf{q} o vetor de onda relacionado pela energia $\bar{E} = \bar{E}(q)$.

Agora podemos usar a relação de continuidade da função de onda e desenvolver as condições de contorno do potencial para esquerda

$$\psi_E(0) = \Phi(0) \quad \frac{\partial \psi_E}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad , \quad (3.5a)$$

e para direita

$$\psi_E(L) = \Phi(L) \quad \frac{\partial \psi_D}{\partial x} \Big|_{x=L} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=L} \quad , \quad (3.5b)$$

onde Φ é a função de onda no interior do potencial.

Uma vez que queremos um caso mais geral, considerando um potencial arbitrário, iremos apresentar a solução da equação em termos apenas das amplitudes das ondas fora do potencial. A ideia é verificar que podemos relacionar as ondas de saída e de entrada pela relação

$$\begin{pmatrix} \psi_E^-(0) \\ \psi_D^+(L) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_E^+(0) \\ \psi_D^-(L) \end{pmatrix} \quad , \quad (3.6)$$

sendo

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad , \quad (3.7)$$

chamado de matriz de espalhamento.

Também podemos relacionar as ondas do lado esquerdo com as do lado direito

$$\begin{pmatrix} \psi_D^+(L) \\ \psi_D^-(L) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_E^+(0) \\ \psi_E^-(0) \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

com

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

chamado de matriz de transferência.

Podemos estabelecer uma relação entre os elementos da matriz de espalhamento com a matriz de transferência. Com esse intuito, podemos explicitar as Eqs. (3.6) e (3.8) dados por

$$\begin{cases} \psi_E^- = S_{11} \psi_E^+ + S_{12} \psi_D^-, \\ \psi_D^+ = S_{21} \psi_E^+ + S_{22} \psi_D^-, \end{cases} \quad (3.10)$$

e

$$\begin{cases} \psi_D^+ = M_{11} \psi_E^+ + M_{12} \psi_E^-, \\ \psi_D^- = M_{21} \psi_E^+ + M_{22} \psi_E^-, \end{cases} \quad (3.11)$$

de maneira que podemos escrever

$$\psi_D^- = \frac{1}{S_{12}} \psi_E^- - \frac{S_{11}}{S_{12}} \psi_E^+. \quad (3.12)$$

Aplicando na segunda equação de Eq. (3.10)

$$\psi_D^+ = \left(S_{21} - \frac{S_{11}S_{22}}{S_{12}} \right) \psi_E^+ + \frac{S_{22}}{S_{12}} \psi_E^-, \quad (3.13)$$

comparando com a Eq. (3.11) de cima

$$M_{11} = S_{21} - \frac{S_{11}S_{22}}{S_{12}} \quad \text{e} \quad M_{12} = \frac{S_{22}}{S_{12}}, \quad (3.14)$$

relacionando a Eq. (3.11) inferior

$$M_{21} = -\frac{S_{11}}{S_{12}}, \quad \text{e} \quad M_{22} = \frac{1}{S_{12}}, \quad (3.15)$$

portanto

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{11}S_{22}}{S_{12}} & \frac{S_{22}}{S_{12}} \\ -\frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

notando que

$$\det M = \frac{S_{21}}{S_{12}}. \quad (3.17)$$

Recorrendo a mesma ideia, podemos expressar a matriz de espalhamento em termos dos elementos da matriz de transferência. Para isso devemos usar a Eq. (3.11) para explicitar

$$\psi_E^- = \frac{1}{M_{22}} \psi_D^- - \frac{M_{21}}{M_{22}} \psi_E^+, \quad (3.18)$$

substituindo na Eq. (3.11) superior

$$\psi_D^+ = \left(M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} \right) \psi_L^+ + \frac{M_{12}}{M_{22}} \psi_L^+, \quad (3.19)$$

de forma que

$$S_{11} = -\frac{M_{21}}{M_{22}} \quad \text{e} \quad S_{12} = \frac{1}{M_{22}}, \quad (3.20)$$

$$S_{21} = M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} \quad \text{e} \quad S_{22} = \frac{M_{12}}{M_{22}}, \quad (3.21)$$

portanto

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{M_{21}}{M_{22}} & \frac{1}{M_{22}} \\ M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} & \frac{M_{12}}{M_{22}} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Devemos ressaltar que a matriz S é composta por 4 parâmetros complexos e em geral por 8 parâmetros reais. De forma que ao resolvermos problemas físicos, seremos capazes de usar simetrias físicas para reduzir o número de parâmetros independentes, sendo duas simetrias: a conservação da corrente e a simetria de reversão temporal que veremos nas seções seguintes.

3.1.2 Conservação da densidade de corrente

Aqui iremos apresentar os cálculos para uma das simetrias mencionadas anteriormente, chamada de Conservação da densidade de corrente, onde verificaremos que ao considerarmos que a densidade de corrente se conserva, poderemos reduzir o número de variáveis independentes que o nosso problema físico apresenta.

A ideia, como mencionado antes, é considerar que a densidade de corrente que entra pela região de espalhamento é igual a densidade de corrente que deixa a região de espalhamento,

sem perdas e nem criação de elétrons, considerando o mesmo sistema unidimensional da Fig. 25 portanto é coerente falar que

$$j(x=0) = j(x=L), \quad (3.23)$$

sendo $j(x)$ a densidade de corrente em qualquer ponto x , em que definimos mais especificamente a densidade de corrente por

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} - \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right], \quad (3.24)$$

para uma onda plana do tipo $\psi(x) = Ae^{ikx}$

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[Ae^{ikx} \frac{\partial (A^* e^{-ikx})}{\partial x} - A^* e^{-ikx} \frac{\partial (Ae^{ikx})}{\partial x} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[Ae^{ikx} (-ikA^* e^{-ikx}) - A^* e^{-ikx} (Aike^{ikx}) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2m} [AA^*k + A^*Ak] \\ &= \frac{\hbar k |A|^2}{m} = \frac{\hbar k |\psi|^2}{m}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

tornando-se independente de x .

Agora podemos expressar a densidade de corrente antes e depois do espalhador como respectivamente

$$\begin{cases} j_E = j(x=0) = \frac{\hbar q}{m} [|\psi_E^+|^2 - |\psi_E^-|^2], \\ j_D = j(x=L) = \frac{\hbar q}{m} [|\psi_D^+|^2 - |\psi_D^-|^2], \end{cases} \quad (3.26)$$

fazendo então $j_E = j_D$, obteremos

$$\frac{\hbar q}{m} [|\psi_E^+|^2 - |\psi_E^-|^2] = \frac{\hbar q}{m} [|\psi_D^+|^2 - |\psi_D^-|^2], \quad (3.27)$$

organizando os termos e escrevendo na forma matricial

$$\begin{pmatrix} \psi_E^{-*} & \psi_D^{+*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_E^- \\ \psi_D^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_E^{+*} & \psi_D^{-*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ \psi_D^- \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

pela relação das ondas de saída e de entrada, obteremos a matriz S

$$\begin{pmatrix} \psi_E^- \\ \psi_D^+ \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ \psi_D^- \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

e o seu complexo conjugado

$$\begin{pmatrix} \psi_E^{-*} & \psi_D^{+*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_E^{+*} & \psi_D^{-*} \end{pmatrix} S^\dagger, \quad (3.30)$$

na qual podemos observar que

$$S^\dagger S = I, \quad (3.31)$$

portanto

$$\begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{12}^* \\ S_{21}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

sendo I a matriz identidade, podemos portanto observar que

$$\begin{cases} |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1, \\ S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0, \\ S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} = 0, \\ |S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1. \end{cases} \quad (3.33)$$

3.1.2.1 Propriedades da matriz S

Com o intuito de apresentar ferramentas úteis para o nosso uso futuro, esta seção irá apresentar duas propriedades interessantes que podemos retirar da forma como definimos a matriz S e dos resultados obtidos ao considerar a conservação da densidade de corrente, nos dando a possibilidade de estabelecer uma relação entre os elementos da matriz S .

A primeira propriedade que iremos demonstrar no decorrer desta seção é o modulo de determinante dado por

$$|\det S| = 1. \quad (3.34)$$

Para isso vamos definir duas matrizes A e B , tal que

$$\det(AB) = \det A \det B. \quad (3.35)$$

Neste caso temos as matrizes S e S^\dagger que deve admitir a relação

$$S^\dagger S = 1. \quad (3.36)$$

Então,

$$\det(S^\dagger S) = \det S^\dagger \det S = 1, \quad (3.37)$$

sendo

$$\det S^\dagger = S_{11}^* S_{22}^* - S_{12}^* S_{21}^*, \quad (3.38a)$$

$$\det S = S_{11} S_{22} - S_{12} S_{21}. \quad (3.38b)$$

Devemos observar que

$$(\det S)^* = \det S^\dagger, \quad (3.39)$$

portanto

$$\det S^\dagger \det S = (\det S)^* \det S = 1, \quad (3.40)$$

mostrando assim a relação desejada

$$|\det S|^2 = 1. \quad (3.41)$$

Podemos também demonstrar que ao multiplicarmos a Eq. (3.31) por S^{-1} em ambos os lados da equação pela direita, iremos ter

$$S^\dagger = S^{-1}, \quad (3.42)$$

podendo portanto escrever

$$\begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\det S} \begin{pmatrix} S_{22} & -S_{21} \\ -S_{12} & S_{11} \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

de forma que obtemos

$$S_{22}^* = \frac{S_{11}}{\det S}, \quad (3.44a)$$

e

$$S_{11}^* = \frac{S_{22}}{\det S}. \quad (3.44b)$$

Multiplicando ambos os lados por S_{11} e substituindo a Eq. (3.44a), obtemos

$$|S_{11}| = |S_{22}|, \quad (3.45)$$

Usando essas informações da Eq. (3.33)

$$|S_{12}| = |S_{21}|, \quad (3.46)$$

e lembrando que o módulo de um número complexo é igual ao módulo de seu conjugado, então temos

$$|S_{12}^*| = |S_{21}^*|, \quad (3.47a)$$

$$|S_{12}^*| = |S_{21}|, \quad (3.47b)$$

ou

$$|S_{12}| = |S_{21}^*|, \quad (3.47c)$$

estabelecendo uma relação entre os elementos da matriz de espalhamento, sendo uma premissa para que sejamos capazes de reduzir os parâmetros da matriz S .

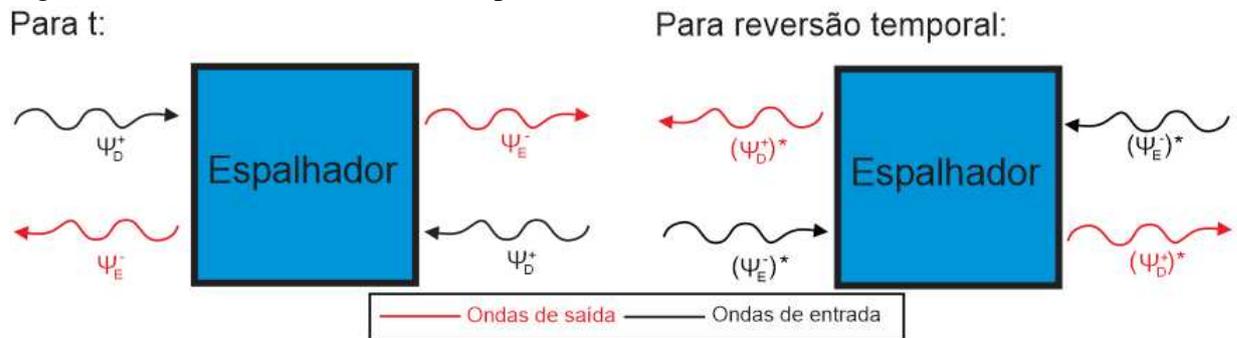
3.1.3 Simetria de conservação de reversão temporal e matriz S/M

Agora o intuito desta seção é apresentar a segunda condição de simetria que consideraremos nos nossos problemas físicos futuros. A ideia é a que o sistema físico apresenta simetria de reversão temporal, ou seja, nosso problema possui uma simetria com respeito a invariância temporal, a qual nos permitirar reduzir o número de parâmetros na matriz de espalhamento.

Se o sistema possuir simetria de reversão temporal e se ψ é uma solução da equação de Schrödinger, então o seu complexo conjugado ψ^* também é solução. Neste caso se as funções de onda de saída do potencial são ondas planas, e^{iqx} e e^{-iqx} , com estados que se propagam em sentidos opostos, temos o mesmo sistema físico anterior, mas agora teremos que a definição da matriz de espalhamento S que relaciona as ondas de entrada com as de saída dada pela Eq. (3.29), então para o caso de reversão temporal

$$\begin{pmatrix} \psi_E^{+*} \\ \psi_D^{-*} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_E^{-*} \\ \psi_D^{+*} \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Figura 26 – Simetria de Reversão temporal.



Fonte: Elaborado pelo autor

Para o caso sem reversão temporal, nós definimos antes que

$$\begin{pmatrix} \psi_E^- \\ \psi_D^+ \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ \psi_D^- \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

e seu complexo conjugado é

$$\begin{pmatrix} \psi_E^{-*} \\ \psi_D^{+*} \end{pmatrix} = S^* \begin{pmatrix} \psi_E^{+*} \\ \psi_D^{-*} \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Substituindo na equação de reversão temporal iremos obter

$$SS^* = 1 = S^*S. \quad (3.51)$$

Escrevendo explicitamente pelos elementos da matriz S , então temos

$$\begin{cases} |S_{11}|^2 + S_{12}^* S_{21} = 1, \\ S_{11}^* S_{12} + S_{12}^* S_{22} = 0, \\ S_{21}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} = 0, \\ S_{21}^* S_{12} + |S_{22}|^2 = 1. \end{cases} \quad (3.52)$$

Anteriormente, fizemos o caso onde o sistema apresenta conservação da densidade de corrente, de forma que

$$\begin{cases} S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0, \\ S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} = 0. \end{cases} \quad (3.53)$$

Comparando com as equações do caso de reversão temporal

$$\begin{cases} S_{11}^* S_{12} + S_{12}^* S_{22} = 0, \\ S_{21}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} = 0. \end{cases} \quad (3.54)$$

Comparando os dois casos, podemos ver que se o sistema possuir ambas simetria de reversão temporal e conservação na densidade de corrente, a matriz S torna-se uma matriz simétrica, onde

$$S_{12} = S_{21}. \quad (3.55)$$

Agora iremos verificar as implicações dos elementos da matriz de transferência devido a simetria de reversão temporal. Para isso iremos usar os mesmos argumentos anteriores e utilizaremos o caso sem reversão temporal, dado por

$$\begin{pmatrix} \psi_D^+ \\ \psi_D^- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ \psi_E^- \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

e com reversão temporal

$$\begin{pmatrix} \psi_D^{-*} \\ \psi_D^{+*} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_E^{-*} \\ \psi_E^{+*} \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Assim podemos reescrever da Eq. (3.57)

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_D^{-*} \\ \psi_D^{+*} \end{pmatrix} &= \sigma_x \begin{pmatrix} \psi_D^{+*} \\ \psi_D^{-*} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_E^{-*} \\ \psi_E^{+*} \end{pmatrix} \\ &= M \sigma_x \begin{pmatrix} \psi_E^{+*} \\ \psi_E^{-*} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.58)$$

lembrando que σ_x é dado por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.59)$$

Agora fazendo o complexo conjugado da Eq. (3.56)

$$\begin{pmatrix} \psi_D^{+*} \\ \psi_D^{-*} \end{pmatrix} = M^* \begin{pmatrix} \psi_E^{+*} \\ \psi_E^{-*} \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

multiplicando essa equação por σ_x pelos dois lados da igualdade e comparando o resultado com a Eq. (3.58), obteremos que

$$\sigma_x M^* = M \sigma_x. \quad (3.61)$$

Uma vez que $\sigma_x \sigma_x = 1$, admitiremos o resultado

$$M^* = \sigma_x M \sigma_x = \begin{pmatrix} M_{22} & M_{21} \\ M_{12} & M_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

Portanto podemos observar que ao considerarmos um sistema com simetria de reversão temporal, iremos poder reduzir o número de 8 parâmetros para 4, isso por que devemos tirar da equação anterior que $M_{11}^* = M_{22}$, $M_{12}^* = M_{21}$, $M_{21}^* = M_{12}$ e $M_{22}^* = M_{11}$.

3.2 Amplitude de transmissão e reflexão

Nesta parte iremos apresentar uma interpretação física para os elementos da matriz de espalhamento partindo da sua definição, de forma que iremos apresentar a matriz em termos das amplitudes de transmissão e reflexão, posteriormente consideraremos as simetrias físicas anteriores e aplicaremos estes resultados para obtermos a matriz de espalhamento e a matriz de transferência para o caso dos parâmetros reduzidos.

Agora iremos encontrar o significado físico dos elementos da matriz de espalhamento, para isso iremos considerar novamente o problema de espalhamento representado na Fig. 27.

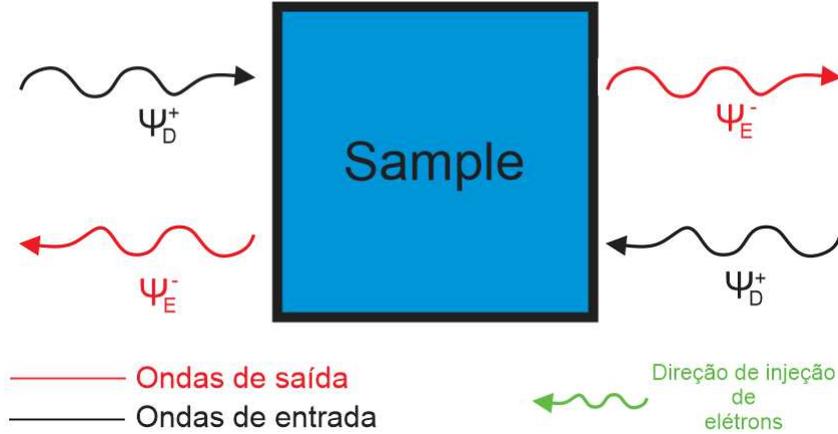
Assumiremos que a partícula é injetada do lado direito do potencial e nem uma partícula vem do lado esquerdo, portanto

$$\psi_E^+ = 0. \quad (3.63)$$

Da definição da matriz S teremos

$$\begin{pmatrix} \psi_E^- \\ \psi_D^+ \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_E^+ \\ \psi_D^- \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

Figura 27 – Elétron sendo injetado da direita para a esquerda e a representação das funções de onda de entrada e saída da região de espalhamento.



Fonte: Elaborado pelo autor

então a onda transmitida ψ_E^- pode ser dada por

$$\psi_E^- = S_{11}\psi_E^+ + S_{12}\psi_D^- = S_{12}\psi_D^- \quad (3.65)$$

Portanto podemos chamar $S_{12} = t$ de amplitude de transmissão e também para a onda refletida ψ_D^+ devemos ter

$$\psi_D^+ = S_{21}\psi_E^+ + S_{22}\psi_D^-, \quad (3.66)$$

e obteremos

$$\psi_D^+ = S_{22}\psi_D^-. \quad (3.67)$$

Dessa forma, o termo $S_{22} = r$ é conhecido como amplitude de reflexão. Agora, do mesmo modo podemos considerar a propagação da partícula vindo do lado esquerdo, onde podemos obter

$$\psi_E^- = S_{11}\psi_E^+ + S_{12}\psi_D^- = S_{11}\psi_E^+, \quad (3.68a)$$

$$\psi_D^+ = S_{21}\psi_E^+ + S_{22}\psi_D^- = S_{21}\psi_E^+. \quad (3.68b)$$

Desta maneira, temos que a amplitude de reflexão e transmissão para as partículas ejetadas no lado esquerdo são dadas respectivamente por $S_{11} = r'$ e $S_{21} = t'$. Então, finalmente a matriz de espalhamento pode ser escrita em termos das amplitudes de reflexão e transmissão como

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

Da mesma forma, podemos fazer para a matriz de transferência ao usarmos

$$M = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}} & \frac{S_{21}}{S_{12}} \\ -\frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t' - \frac{rr'}{t} & \frac{r}{t} \\ -\frac{r'}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}, \quad (3.70)$$

para a amplitude de reflexão e transmissão, dada por $r = S_{22}$ e $t = S_{12}$, repectivamente, podemos definir o coeficiente de reflexão e transmissão como sendo a probabilidade que a partícula é refletida e transmitida

$$T = |t|^2 \quad \text{e} \quad R = |r|^2. \quad (3.71)$$

Pela propriedade simétrica da matriz de espalhamento como consequência da conservação da densidade de corrente, que fala

$$\begin{cases} |S_{11}| = |S_{22}|, \\ |S_{12}| = |S_{21}|, \end{cases} \quad (3.72)$$

portanto $|r| = |r'|$ e $|t| = |t'|$. Agora, se utilizarmos a primeira e a quarta equação da (3.33) devemos obter

$$|r'|^2 + |S_{21}|^2 = 1, \quad (3.73a)$$

$$|r|^2 + |t|^2 = 1, \quad (3.73b)$$

de forma que

$$R + T = 1. \quad (3.74)$$

Isso significa fisicamente que o sistema não pode ter nem perdas e nem ganhos, então os elétrons podem ser refletidos ou transmitidos através do espalhador, mas deve manter a conservação do número de carga e consequentemente a reflexão e transmissão devem obter a condição de conservação mostrada na equação anterior.

Agora, se utilizarmos a propriedade $S^\dagger S = I$ da conservação da densidade de corrente, podemos obter

$$S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0, \quad (3.75)$$

então

$$\frac{r}{t} = - \left(\frac{r'}{t'} \right). \quad (3.76)$$

Portanto, podemos ajustar o elemento M_{11} da matriz de transferência por

$$M_{11} = t' - \frac{rr'}{t} = t' + \frac{|r|^2}{(t')^*} = \frac{1}{(t')^*}, \quad (3.77)$$

de forma que a matriz M fica

$$M = \begin{pmatrix} (t')^{*-1} & rt^{-1} \\ -t^{-1}r' & t^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.78)$$

Em adição a isso, no caso em que também consideramos a simetria de reversão temporal, nós previamente mostramos que $S_{12} = S_{21}$, conseqüentemente devemos ter $t = t'$. Portanto, quando o sistema tiver ambos conservação da densidade de corrente e simetria de reversão temporal, poderemos expressar a matriz M como

$$M = \begin{pmatrix} (t^*)^{-1} & rt^{-1} \\ -t^{-1}r' & t^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.79)$$

3.2.1 Propriedades da matriz de transferência

A matriz de transferência nos permite investigar as propriedades de uma região de espalhamento através de um experimento de espalhamento, isso significa que podemos encontrar as propriedades do sistema através das respostas de espalhamento, medindo as ondas de transmissão e reflexão através de um certo potencial.

Todos os elementos da matriz S e M , assim como os coeficientes de reflexão e transmissão T e R são funções de vetor de onda \mathbf{q} , que é associado com as ondas planas dos *Leads*, e por sua vez a transmissão (t) e reflexão (r) também dependem de q ou equivalentemente da energia $E = E(q)$. Isso é importante para mencionar que a propriedade de simetria da matriz de transferência é derivada ao assumir que os *Leads* em ambos os lados do espalhador são iguais. Portanto, em uma perspectiva mais geral, onde os *Leads* são diferentes, algumas das relações de simetrias obtidas podem não ser satisfeitas.

Podemos encontrar na literatura outras definições de matriz de transferência usando uma relação linear entre os coeficientes das ondas de chegada e de saída A , B , C e D , nas funções de ondas $\psi_E^+ = Ae^{iqx}$, $\psi_E^- = Be^{-iqx}$, $\psi_D^+ = Ce^{iqx}$ e $\psi_E^+ = De^{-iqx}$. Nas versões do método da matriz de transferência, podemos ter

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.80)$$

em vez de

$$\begin{pmatrix} \Psi_D^+ \\ \Psi_D^- \end{pmatrix}_{x=l} = M \begin{pmatrix} \Psi_E^+ \\ \Psi_E^- \end{pmatrix}_{x=0}. \quad (3.81)$$

Note que a região de espalhamento começa em $x = 0$ e termina em $x = l$, portanto agora que podemos usar as equações acima para encontrar a relação entre T e M ao fazermos

$$\begin{pmatrix} \Psi_D^+ \\ \Psi_D^- \end{pmatrix}_{x=l} = \begin{pmatrix} Ce^{iqx} \\ De^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=l} = \begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=l} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=l} T \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.82)$$

usando o lado esquerdo da Eq. (3.81) e

$$M \begin{pmatrix} \Psi_E^+ \\ \Psi_E^- \end{pmatrix}_{x=0} = M \begin{pmatrix} Ae^{iqx} \\ Be^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=0} = M \begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=0} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.83)$$

então

$$\begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=l} T \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}_{x=0} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.84)$$

e aplicando os valores de x , podemos encontrar

$$M = \begin{pmatrix} e^{iqx} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix} T. \quad (3.85)$$

É interessante notar que para o caso do potencial $V = 0$, é fácil de ver que a matriz T é a matriz unitária desde que as ondas de propagação são as mesmas e portanto $A = C$ e $B = D$. Um outro ponto interessante é que a matriz M possui o fator de fase $e^{\pm iql}$, do qual as partículas vão se mover entre $x = 0$ e $x = l$,

$$M_{V=0} = \begin{pmatrix} e^{iql} & 0 \\ 0 & e^{-iqx} \end{pmatrix}. \quad (3.86)$$

Esta fase pode ser entendida como uma adição de fase sobre uma translação espacial, ainda devemos resaltar que as matrizes T e M são os mesmos em ambos os formalismos, uma vez que ambos as matrizes diferem apenas por um fator de fase.

3.2.2 Múltiplas regiões de espalhamento

Agora vamos considerar um experimento mais complicado, no qual a partícula é espalhada por duas regiões de espalhamento caracterizadas pelos potenciais $V_1(a < x < b)$ e

$V_2(b < x < c)$. Duas propriedades podem ser usadas para encontrar a transmissão e reflexão, primeiramente usando as matrizes de transferência de M_1 (primeiro espalhador) e M_2 (segundo espalhador) individualmente. Segundo, usando a matriz de transferência M_{12} que corresponde ao potencial V_{12} definido em todo o intervalo $a < x < c$.

Para desenvolver a relação entre as matrizes de transferência, expressaremos as funções de onda nas três regiões

$$\psi_E = \psi_E^+ + \psi_E^-, \quad x < a, \quad (3.87a)$$

$$\psi(x=b) = \psi^+(b) + \psi^-(b), \quad x = b, \quad (3.87b)$$

$$\psi_D = \psi_D^+ + \psi_D^-, \quad x > c. \quad (3.87c)$$

Pela definição da matriz de transferência que conecta as ondas do lado direito com as do lado esquerdo, podemos ter para o potencial V_1 que

$$\begin{pmatrix} \psi^+(b) \\ \psi^-(b) \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} \psi_E^+(a) \\ \psi_E^-(a) \end{pmatrix}, \quad (3.88)$$

e para o potencial V_2 que

$$\begin{pmatrix} \psi_D^+(c) \\ \psi_D^-(c) \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} \psi^+(b) \\ \psi^-(b) \end{pmatrix}, \quad (3.89)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} \psi_D^+(c) \\ \psi_D^-(c) \end{pmatrix} = M_{12} \begin{pmatrix} \psi_E^+(a) \\ \psi_E^-(a) \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

onde podemos definir

$$M_{12} = M_1 M_2, \quad (3.91)$$

no qual consideramos ambas as regiões de espalhamento como uma única, cuja o potencial será regido por V_{12} .

3.2.3 Estados propagantes

Agora iremos investigar as condições suficientes para que ocorra a existência de soluções com estados propagantes. Para fazer isso, consideraremos um sistema com simetria de

reversão temporal. Como discutimos anteriormente, para um sistema com simetria de reversão temporal, temos

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix}. \quad (3.92)$$

Consequentemente

$$\det M = 1, \quad (3.93)$$

e também

$$Tr(M) = M_{11} + M_{22} = M_{11} + M_{11}^* \quad (3.94)$$

sendo este um número real.

Sendo λ_1 e λ_2 dois autovalores da matriz de transferência, então sabemos da álgebra linear que

$$Tr\{M\} = \lambda_1 + \lambda_2, \quad (3.95a)$$

$$\det(M) = \lambda_1 \lambda_2. \quad (3.95b)$$

Usando as Eqs. (3.93) e (3.95b), obtemos

$$\lambda_2 = \frac{1}{\lambda_1}. \quad (3.96)$$

Da análise dos estados propagantes, podemos distinguir dois casos, para $|\lambda_1| = 1$ ou para $|\lambda_1| \neq 1$, assumindo outros valores. Esta condição é aplicada apenas em relação a um autovalor, desde que os outros sejam escritos como função de λ_1 .

- Para o primeiro caso, onde $|\lambda_1| = 1$

Para esse caso, podemos escrever $\lambda_1 = e^{iq_l}$, onde q é o vetor de onda e admite um valor real, portanto podemos fazer $\lambda_2 = e^{-iq_l}$ e também

$$Tr\{M\} = \lambda_1 + \lambda_2 = e^{iq_l} + e^{-iq_l} = 2\cos(q_l), \quad (3.97)$$

como $0 \leq |\cos(\theta)| \leq 1$, consequentemente

$$|Tr\{M\}| \leq 2. \quad (3.98)$$

- Para o segundo caso, onde $|\lambda_1| \neq 1$

De uma forma semelhante, assumindo $\lambda_1 = e^{iql}$, mas agora q pertence aos complexos, então

$$|Tr\{M\}| = |\lambda_1 + \lambda_2 = e^{kl} + e^{-kl}| = |2 \cosh(kl)|, \quad (3.99)$$

onde $k = iq$ e sabendo que $|\cosh \theta| \geq 1$, então $|Tr\{M\}| \geq 2$.

Devemos notar que $|\lambda_1| = \sqrt{\lambda_1^* \lambda_1}$, e para o primeiro caso devemos ter $\lambda_1 = e^{iql}$ com $q \in \mathbb{R}$, sendo $|\lambda_1| = \sqrt{e^{-iql} e^{iql}} = 1$. Agora, para o segundo caso assumimos que $\lambda_1 = e^{kl}$ com $k \in \mathbb{R}$. Fisicamente falando, $|Tr\{M\}| \leq 2$ representa a condição suficiente para a existência de soluções propagantes. Devemos notar que no segundo caso temos uma solução do tipo $\lambda_1 = e^{kl}$ que tem a amplitude de onda de transmissão decrescente exponencialmente com o decrescimento do comprimento da barreira de potencial.

3.2.4 Estados ligados

Nesta seção, encontraremos a expressão analítica baseada no método da matriz de transferência que dá os estados ligados para um barreira de potencial, na qual iremos estabelecer uma equação transcendental com os elementos da matriz M .

Consideraremos que um poço de potencial unidimensional $V(x) < 0$ sempre tem ao menos um estado ligado, e que estes estados são caracterizados por funções que decaem exponencialmente em ambos os lados do potencial. Agora iremos utilizar o método da matriz de transferência para estimar a energia dos estados ligados. Primeiramente iremos considerar o esquema da Fig. 27, assim iremos ter

$$\psi_E(x) = \psi_E^+(x) + \psi_E^-(x) = Ae^{iqk} + Be^{-iqk}, \quad x < 0, \quad (3.100a)$$

$$\psi_D(x) = \psi_D^+(x) + \psi_D^-(x) = Ce^{iqk} + De^{-iqk}, \quad x > l, \quad (3.100b)$$

sendo ψ decrescente para $x > l$ e $x < 0$. Portanto, com o objetivo de evitar as soluções que tornam as exponenciais muito grandes, relembramos que $q \in \mathbb{C}$ e para $q = ik$ com $k > 0$, daí

$$\psi_E(x) = Ae^{-kx} + Be^{+kk}, \quad (3.101a)$$

$$\psi_D(x) = Ce^{-kx} + De^{kx}. \quad (3.101b)$$

Note que A deve ser zero ou equivalentemente $\psi_L^+ = 0$ para $x < 0$ e B deve ser zero ou equivalentemente $\psi_D^- = 0$ para $x > l$, portanto

$$\psi_E(x) = Be^{+kk}, \quad \text{para } x < 0 \text{ e } k > 0 \quad (3.102a)$$

$$\psi_D(x) = Ae^{-kx}, \quad \text{para } x > l \text{ e } k > 0 \quad (3.102b)$$

Substituindo as Eqs. (3.102a) e (3.102b) na definição da matriz de transferência

$$\begin{pmatrix} \psi_D^+(x=l) \\ \psi_D^-(x=l) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_E^+(x=0) \\ \psi_E^-(x=0) \end{pmatrix}, \quad (3.103)$$

ou equivalentemente

$$\psi_D^+(x=l) = M_{11}\psi_E^+(x=0) + M_{12}\psi_E^-(x=0), \quad (3.104a)$$

$$\psi_D^-(x=l) = M_{21}\psi_D^+(x=0) + M_{22}\psi_D^-(x=0). \quad (3.104b)$$

Usando as condições de ψ_E^+ e ψ_D^- , encontramos que

$$M_{22} = 0. \quad (3.105)$$

Portanto, podemos verificar que precisamos satisfazer a seguinte condição da equação

$$M_{22} = M_{22}(q) = M_{22}(ik) = 0 \quad \text{para } k > 0, \quad (3.106)$$

para que exista estados ligados.

Agora, se dissermos que $q = ik$ com $k < 0$, devemos obter uma solução com $B = 0$ e $C = 0$ ou equivalentemente $\psi_E^- = 0$ e $\psi_D^+ = 0$ para $x < 0$ e $x > l$, respectivamente, com o objetivo de evitar as soluções que fazem a exponencial crescer. Portanto, para substituir $\psi_E^- = 0$ e $\psi_D^+ = 0$ até a equação da matriz de transferência, nós obtemos

$$\psi_D^+(x=l) = M_{11}\psi_E^+(x=0) + M_{12}\psi_E^-(x=0), \quad (3.107a)$$

$$\psi_D^-(x=l) = M_{21}\psi_D^+(x=0) + M_{22}\psi_D^-(x=0), \quad (3.107b)$$

de forma que

$$M_{11} = M_{11}(q) = M_{11}(iq) = 0 \quad \text{para } k < 0. \quad (3.108)$$

Ambas as soluções das Eqs. (3.108) e 3.106 para $k < 0$ e $k > 0$, respectivamente, podem encontrar os estados ligados ao determinar as raízes das equações transcendentais, onde as raízes são k permitidos associados a energia E , sendo $E = E(q) = E(ik)$.

3.3 Identidade de Chebyshev

Nesta seção, iremos apresentar uma identidade muito importante que pode simplificar um problema de múltiplas barreiras ao considerarmos que cada barreira do sistema são idênticas,

Ao fazermos isso, iremos poder afirmar que a partícula que passa pela primeira barreira, admite uma matriz de transferência M_1 igual a matriz de transferência M_2 da partícula ao passar pela barreira dois e que também é igual para todas as outras N barreiras idênticas. Este método é conhecido como identidade de Chebyshev.

Se então considerarmos as barreiras idênticas, como falado anteriormente, iremos obter

$$M_1 = M_2 = M_3 = \dots = M_N. \quad (3.109)$$

Portanto a matriz resultante para todo o sistema é

$$M = M_1 M_2 M_3 \dots M_N = M_1^N, \quad (3.110)$$

sendo

$$M_1^N = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}^N. \quad (3.111)$$

Desta forma a identidade irá nos permitir expressar a Eq. (3.111) em termos dos elementos da matriz M_1 , sendo conhecida como a identidade de Chebyshev.

A identidade de Chebyshev afirma que a n -ésima potência da matriz de transferência

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.112)$$

com autovalores $\lambda_1 = e^{iql}$ e $\lambda_2 = e^{-iql}$ pode ser expressa como

$$M^N = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} M_{11}U_{N-1} - U_{N-2} & M_{12}U_{N-1} \\ M_{21}U_{N-1} & M_{22}U_{N-1} - U_{N-2} \end{pmatrix}, \quad (3.113)$$

onde $U_N = U_N(q)$ é definido como

$$U_N = \frac{\sin[(N+1)ql]}{\sin(ql)}, \quad (3.114)$$

e ql é dado pelo autovalor da matriz de identidade M

$$Tr\{M\} = \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(ql). \quad (3.115)$$

Toda a identidade acima é válida quando $q \in \mathbb{R}$ com $|\lambda_1| = 1$ para estados propagantes e $|\lambda_1| > 1$ com $q \in \mathbb{C}$.

Agora vamos provar a identidade de Chebyshev pela indução matemática, primeiramente note que a identidade da Eq. (3.113) é satisfeita para $N = 1$

$$M^1 = \begin{pmatrix} M_{11}U_0 - U_{-1} & M_{12}U_0 \\ M_{21}U_0 & M_{22}U_0 - U_{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.116)$$

pela Eq. 3.114, temos que

$$U_0 = \frac{\sin[(0+1)ql]}{\sin(ql)} = 1 \quad \text{e} \quad U_{-1} = \frac{\sin[(-1+1)ql]}{\sin(ql)} = 0. \quad (3.117)$$

Portanto, obtemos

$$M^1 = \begin{pmatrix} M_{11}U_0 - U_{-1} & M_{12}U_0 \\ M_{21}U_0 & M_{22}U_0 - U_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.118)$$

Agora assumiremos que a identidade também é válida para $N \geq 1$, portanto, mostraremos que é valido também para $N + 1$, assim

$$M^{N+1} = MM^N = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}U_{N-1} - U_{N-2} & M_{12}U_{N-1} \\ M_{21}U_{N-1} & M_{22}U_{N-1} - U_{N-2} \end{pmatrix}, \quad (3.119)$$

e fazendo o produto matricial, obtêm-se que

$$M^{N+1} = \begin{pmatrix} [M_{11}^2 + M_{12}]U_{N-1} - M_{11}U_{N-2} & M_{12}[(M_{11} + M_{22})U_{N-1} - U_{N-2}] \\ M_{21}[(M_{11} + M_{21}^2)U_{N-1} - U_{N-2}] & [M_{12}M_{21} + M_{22}^2]U_{N-1} - M_{22}U_{N-2} \end{pmatrix}. \quad (3.120)$$

Relembrando as seguintes propriedade

$$Tr\{M\} = M_{21} + M_{12} = \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(ql), \quad (3.121a)$$

$$\det(M) = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1, \quad (3.121b)$$

nós podemos simplificar os elementos da matriz M^{N+1} , de forma que

$$\begin{aligned} (M^{N+1})_{11} &= [M_{11}^2 + M_{12}]U_{N-1} - M_{11}U_{N-2} \\ &= [M_{11}(M_{11} + M_{22}) - M_{11}M_{22} + M_{12}M_{21}]U_{N-1} - M_{11}U_{N-2} \\ &= [2M_{11} \cos(ql) - 1]U_{N-1} - M_{11}U_{N-2}. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Com o intuito de simplificar mais a expressão acima, vamos escrever U_{N-2} como uma função de U_{N-1} e U_N , usando a seguinte relação trigonométrica

$$\sin(x \pm y) = \sin(x) \cos(y) \pm \cos(x) \sin(y), \quad (3.123)$$

aplicando

$$U_N(ql) = \frac{\sin[(N+1)ql]}{\sin(ql)} = \frac{\sin(Nql)\cos(ql) + \cos(Nql)\sin(ql)}{\sin(ql)}, \quad (3.124)$$

e para U_{N-2}

$$U_{N-2}(ql) = \frac{\sin[(N-1)ql]}{\sin(ql)} = \frac{\sin(Nql)\cos(ql) - \cos(Nql)\sin(ql)}{\sin(ql)}, \quad (3.125)$$

somando $U_N + U_{N-2}$, encontramos que

$$U_N + U_{N-2} = \frac{2\sin(Nql)\cos(ql)}{\sin(ql)} = 2\cos(ql)U_{N-1}. \quad (3.126)$$

Usando a equação acima na $(M^{N+1})_{11}$, nós encontramos

$$(M^{N+1})_{11} = [2M_{11}\cos(ql) - 1]U_{N-1} - M_{11}[2\cos(ql)U_{N-1} - U_N] = M_{11}U_N - U_{N-2}. \quad (3.127)$$

Para os demais elementos, tem-se que

$$(M^{N+1})_{12} = M_{12}[(M_{11} + M_{22})U_{N-1} - U_{N-2}] = M_{12}U_N, \quad (3.128a)$$

$$(M^{N+1})_{21} = M_{21}[(M_{11} + M_{22})U_{N-1} - U_{N-2}] = M_{21}U_N, \quad (3.128b)$$

$$(M^{N+1})_{22} = [M_{22}^2 + M_{12}M_{21}]U_{N-1} - M_{22}U_{N-2} = M_{22}U_N - U_{N-1}. \quad (3.128c)$$

Reescrevendo os resultados obtidos, temos

$$M^{N+1} = MM^N = \begin{pmatrix} M_{11}U_N - U_{N-1} & M_{12}U_N \\ M_{21}U_N & M_{22}U_N - U_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (3.129)$$

e substituindo $N+1$ por N , obtemos

$$M^N = \begin{pmatrix} M_{11}U_{N-1} - U_{N-2} & M_{12}U_{N-1} \\ M_{21}U_{N-1} & M_{21}U_{N-1} - U_{N-2} \end{pmatrix}, \quad (3.130)$$

sendo a identidade mostrada anteriormente.

3.3.1 Transmissão através de N barreiras idênticas

Aqui iremos apresentar uma aplicação para o método apresentado anteriormente, onde afirmaremos que o sistema possui N barreiras idênticas e a usaremos a forma como definimos a matriz M com as amplitudes de reflexão e transmissão, para então comparar com a matriz de N barreiras de potenciais, e posteriormente aplicar e determinar a transmissão eletrônica.

Baseado na seção anterior, provamos a lei da multiplicação para N barreiras idênticas podendo ser escrita como

$$M^N = \begin{pmatrix} M_{11}U_{N-1} - U_{N-2} & M_{12}U_{N-1} \\ M_{21}U_{N-1} & M_{21}U_{N-1} - U_{N-2} \end{pmatrix}, \quad (3.131)$$

nomeado como a identidade de Chebyshev. Agora vamos encontrar o coeficiente de transmissão neste caso especial de N barreiras idênticas como função da amplitude de reflexão(r) e transmissão(t) para potenciais individuais do sistema periódico.

Primeiramente note que o coeficiente de transmissão pode ser escrito como

$$T = |t|^2 = \frac{|t|^2}{|t|^2 + |r|^2} = \frac{1}{1 + \frac{|r|^2}{|t|^2}}. \quad (3.132)$$

Relembramos que a matriz de transferência pode ser escrita em termos da amplitude de transmissão e reflexão, na qual

$$M = \begin{pmatrix} t' - rt - 1r' & rt^{-1} \\ -t^{-1}r' & t^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.133)$$

sendo

$$M_{12} = \frac{r}{t}. \quad (3.134)$$

Aplicando na Eq. (3.132), temos que

$$T = \frac{1}{1 + |M_{12}|^2}, \quad (3.135)$$

onde da Eq. 3.131, obtemos

$$T = \frac{1}{1 + |M_{12}|^2 U_{N-1}^2}. \quad (3.136)$$

Substituindo U_N , temos

$$T = \frac{1}{1 + \left| \frac{r}{t} \right|^2 \frac{\sin^2[(N+1)ql]}{\sin(ql)}}. \quad (3.137)$$

3.3.2 Caso de uma junção PN

Nesta parte iremos apresentar o transporte eletrônico para uma junção pn que consiste em duas regiões com potenciais constantes e distintos, em que dividiremos essas regiões por (1) e (2), onde a junção ocorre em $x = 0$.

Se as regiões para $x < 0$ e $x > 0$ possuem potenciais constante, então a solução é dada por

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad (3.138a)$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ilx} + B_2 e^{-ilx}, \quad (3.138b)$$

onde podemos definir os números de onda pela equação

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}, \quad (3.139a)$$

$$l = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar}}. \quad (3.139b)$$

se temos potenciais constante, seremos capazes de aplicar as duas condições de contorno dadas por

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad (3.140a)$$

$$v_g \psi_1(0) = v_g \psi_2(0), \quad (3.140b)$$

iremos obter

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad (3.141a)$$

$$k_1^+ A_1 k_1^- B_1 = k_2^+ A_2 + k_2^- B_2. \quad (3.141b)$$

Organizando na forma matricial, obtêm-se que

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k_1^+ & k_1^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k_2^+ & k_2^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.142)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{k_2^- - k_2^+} \begin{pmatrix} k_2^- & -1 \\ -k_2^+ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k_1^+ & k_1^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.143)$$

Ao realizarmos o produto de algumas matrizes podemos determinar a seguinte relação

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_2^- - k_1^+}{k_2^- - k_2^+} & \frac{k_2^- - k_1^-}{k_2^- - k_2^+} \\ \frac{k_1^+ - k_2^+}{k_2^- - k_2^+} & \frac{k_1^- - k_2^+}{k_2^- - k_2^+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.144)$$

Utilizando a equação da transmissão obtida nas seções anteriores dada por

$$T = \left| \frac{\det N}{N_{22}} \right|^2, \quad (3.145)$$

temos então que

$$T = \left| \frac{k_2^- (k_1^- - k_1^+) - k_2^+ (k_1^+ + k_1^-)}{k_2^- - k_2^+} \right|^2. \quad (3.146)$$

3.4 Potencial linear: Caso isotrópico

Essa seção está voltada para determinar a função de onda no interior de um potencial linear em sistema isotrópico unidimensional, onde veremos o aparecimento das equações de Airy e determinaremos a densidade de corrente que utilizaremos para determinar a transmissão eletrônica para uma barreira de potencial linear.

Baseado nesta ideia devemos primeiramente considerar que o potencial é definido pela seguinte relação

$$V(x) = Fex, \quad (3.147)$$

de forma que podemos aplicar na equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi, \quad (3.148)$$

e obter

$$-\frac{d^2\Psi}{dx^2} + lx\Psi = \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi, \quad (3.149)$$

onde definimos

$$l = \frac{2mFe}{\hbar^2}. \quad (3.150)$$

Fazendo uma mudança de coordenada do tipo $y = lx$, temos que

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y - \varepsilon \right) \Psi = 0, \quad (3.151)$$

onde definimos que

$$\varepsilon = \frac{2mEl^2}{\hbar^2}. \quad (3.152)$$

Mudando de variável novamente para $z = y + \varepsilon$, obtemos

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - z \right] \Psi = 0. \quad (3.153)$$

A solução desta equação diferencial já é bem conhecida, sendo dada pelas funções de Airy:

$$\Psi(x) = aA_i(x/l - \varepsilon) + bB_i(x/l - \varepsilon). \quad (3.154)$$

Note ainda que as equações de Airy podem ser dadas em função das equações de Bessel

$$A_i(z) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z}{3}} \left[e^{\pi i/6} H_{1/3}^1(\zeta) + e^{-\pi i/6} H_{1/3}^2(\zeta) \right], \quad (3.155a)$$

$$B_i(z) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z}{3}} \left[e^{-\pi i/6} H_{1/3}^1(\zeta) + e^{\pi i/6} H_{1/3}^2(\zeta) \right], \quad (3.155b)$$

em que

$$H_v^1 = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i(2/3z^{2/3} - 1/2v\pi - 1/4\pi)}, \quad (3.156a)$$

$$H_v^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-i(2/3z^{2/3} - 1/2v\pi - 1/4\pi)}. \quad (3.156b)$$

Isso nos mostra que

$$A_i^*(x) = A_i(x), \quad (3.157a)$$

$$B_i^*(x) = B_i(x), \quad (3.157b)$$

e também que

$$\frac{dA_i^*}{dx} = \frac{dB_i^*}{dx} = -\frac{9i}{4l} z^{1/2} A_i, \quad (3.158a)$$

$$\frac{dB_i^*}{dx} = \frac{dA_i^*}{dx} = -\frac{9i}{4l} z^{1/2} B_i. \quad (3.158b)$$

Agora que sabemos a função de onda no interior de um potencial linear, iremos obter a densidade de corrente nessa região, onde devemos utilizar a seguinte equação

$$J = \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx}, \quad (3.159)$$

de forma que

$$J(x) = \frac{9i}{4l} z^{1/2} (aA_i + bB_i) (a(A_i - B_i) + b(B_i - A_i)). \quad (3.160)$$

Portanto podemos calcular a densidade de corrente através das equações de Airy.

3.4.1 Tunelamento

Conhecendo a densidade de corrente obtida na seção anterior, seremos capazes de buscar uma expressão para a transmissão eletrônica para uma barreira de potencial triangular. Para isso, iremos dividir o sistema em três regiões: antes (1), no interior (2) e depois do potencial (3). Nas regiões (1) e (3), a função de onda é dada na seguinte forma

$$\Psi_{(1)} = A_{(1)} e^{ik_{(1)}x} + B_{(1)} e^{-ik_{(1)}x}, \quad (3.161a)$$

$$\Psi_{(3)} = A_{(3)} e^{ik_{(3)}x} + B_{(3)} e^{-ik_{(3)}x}. \quad (3.161b)$$

Usando a primeira condição de contorno, temos que

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad (3.162)$$

resultando em

$$A_{(1)} + B_{(1)} = aA_i(0) + bB_i(0). \quad (3.163)$$

Aplicando a segunda condição de contorno

$$J_{(1)}(0) = J_{(2)}(0), \quad (3.164)$$

encontramos que

$$\begin{aligned} & 2i(A_{(1)} + B_{(1)})(A_{(1)} - B_{(1)})k \\ &= \frac{9i}{4l} z^{1/2} (aA_i(0) + bB_i(0)) (a(A_i(0) - B_i(0)) + b(B_i(0) - A_i(0))), \end{aligned} \quad (3.165)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2k & 2k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{(1)} \\ B_{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_i(0) & B_i(0) \\ A_i(0) - B_i(0) & B_i(0) - A_i(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (3.166)$$

Reorganizando, obtemos

$$\begin{pmatrix} A_{(1)} \\ B_{(1)} \end{pmatrix} = -\frac{1}{4k} \begin{pmatrix} -2k & -1 \\ -2k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i(0) & B_i(0) \\ A_i(0) - B_i(0) & B_i(0) - A_i(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (3.167)$$

Entre a terceira e segunda região, tem-se que

$$\psi_2(L) = \psi_3(L), \quad (3.168)$$

resultando em

$$aA_i(L) + bB_i(L) = Ce^{ikL}. \quad (3.169)$$

Aplicando a segunda condição de contorno para essas regiões, temos que

$$J_2(L) = J_3(L), \quad (3.170)$$

obtendo assim

$$\frac{9i}{4l} z^{1/2} (aA_i(L) + bB_i(L)) [a(A_i(L) - B_i(L)) + b(B_i(L) - A_i(L))] = 2ikC^2, \quad (3.171)$$

de forma que

$$\frac{9i}{4l} z^{1/2} [a(A_i(L) - B_i(L)) + b(B_i(L) - A_i(L))] = 2ikCe^{-ikL}. \quad (3.172)$$

Portanto

$$\begin{pmatrix} A_i(L) & B_i(L) \\ A_i(L) - B_i(L) & B_i(L) - A_i(L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikL} & 0 \\ e^{-ikL} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.173)$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} B_i(L) - A_i(L) & -B_i(L) \\ B_i(L) - A_i(L) & A_i(L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikL} & 0 \\ e^{-ikL} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.174)$$

onde

$$D = B_i^2(L) - A_i^2(L). \quad (3.175)$$

Agora, substituindo a Eq. (3.174) na Eq. (3.167), tem-se que

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{4Dk} \begin{pmatrix} -2k & -1 \\ -2k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i(0) & B_i(0) \\ A_i(0) - B_i(0) & B_i(0) - A_i(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_i(L) - A_i(L) & -B_i(L) \\ B_i(L) - A_i(L) & A_i(L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikL} & 0 \\ e^{-ikL} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.176)$$

onde o coeficiente de transmissão associado ao tunelamento é dada por

$$\begin{aligned} T &= |t_{11}|^{-2} \\ &= |(2kA_i(0) + A_i(0) - B_i(0)) \left((B_i(L) - A_i(L)) e^{ikL} - B_i(L) e^{-ikL} \right) + \\ &\quad (2kB_i(0) + B_i(0) - A_i(0)) \left((B_i(L) - A_i(L)) e^{ikL} + A_i(L) e^{-ikL} \right)|^{-2} \\ &= |2kA_i(0) \left((B_i(L) - A_i(L)) e^{ikL} - B_i(L) e^{-ikL} \right) + \\ &\quad 2kB_i(0) (B_i(L) - A_i(L)) e^{ikL} + A_i(L) e^{-ikL}|^{-2} \\ &= \frac{1}{4k^2} [B_i(L)B_i^2(0) - A_i^2(0)A_i(L)]^2. \end{aligned} \quad (3.177)$$

3.5 Potencial linear: Caso Anisotrópico

Nesse momento consideraremos o Hamiltoniano H de um elétron no espaço bidimensional anisotrópico sujeito a um potencial $V(r)$, tal que

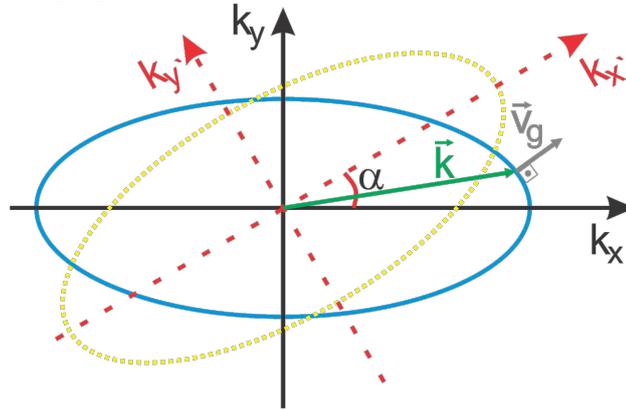
$$H = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + V(x, y), \quad (3.178)$$

onde m_x e m_y são as massas das partículas nas direções x e y .

Devo dizer que a partir deste momento iremos estudar um potencial do tipo $V(x, y)$ é uma barreira de potencial que têm sua orientação escrita arbitrariamente no plano xy . Agora

se realizarmos uma rotação no sistema de eixos com um ângulo α , na qual definimos novos eixos x' e y' para o sistema rotacionado como mostrado na Fig. 28, seremos capazes de reduzir o problema bidimensional para um problema unidimensional. Em um sistema rotacionado

Figura 28 – Visualização geométrica do espectro de energia para uma energia fixa, mostrando o sistema rotacionado e o sistema sem rotação, juntamente com as direções da velocidade de grupo e vetor de onda.



Fonte: Elaborado pelo autor

podemos escrever os momentos na direções x' e y' como

$$p_x = p'_x \cos \alpha - p'_y \sin \alpha, \quad (3.179a)$$

$$p_y = p'_x \sin \alpha + p'_y \cos \alpha, \quad (3.179b)$$

resulta em

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu_x} + \frac{p_y^2}{2\mu_y} + \frac{p_y p_x}{\mu} + V(x'), \quad (3.180)$$

onde definimos as novas massas efetivas nas direções x' e y' como

$$\frac{1}{\mu_x} = \frac{\cos^2 \alpha}{m_x} + \frac{\sin^2 \alpha}{m_y}, \quad (3.181a)$$

$$\frac{1}{\mu_y} = \frac{\sin^2 \alpha}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha}{m_y}, \quad (3.181b)$$

$$\frac{1}{\mu} = \left(\frac{1}{m_y} - \frac{1}{m_x} \right) \sin \alpha \cos \alpha. \quad (3.181c)$$

Substituindo os momentos $p_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ e $p_y = i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ na Eq. (3.180) na equação de Schrödinger, temos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + V\psi. \quad (3.182)$$

É interessante ressaltar ainda que, diferentemente do caso isotrópico, a velocidade de grupo v_g do elétron não é paralela ao vetor de onda k , ver Fig. 28. Para demonstrar isso, basta lembrar que a velocidade de grupo é definida como

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{k'} H. \quad (3.183)$$

Usando a definição do Hamiltoniano para o caso anisotrópico rotacionado, temos que

$$\mathbf{v}_g = \hbar \left[\left(\frac{k_{x'}}{\mu_x} + \frac{k_{y'}}{\mu} \right) \hat{x} + \left(\frac{k_{y'}}{\mu_y} + \frac{k_{x'}}{\mu} \right) \hat{y} \right]. \quad (3.184)$$

Note que V depende apenas da variável espacial x_0 , logo a dependência da função de onda em y_0 deve ser dada pelas autofunções do operador $p_{y'}$. Portanto, podemos escrever

$$\psi(x', y') = \phi(x') e^{ik_y y} e^{-i\omega t}, \quad (3.185)$$

com $\omega = E/\hbar$. Substituindo a Eq. (3.185) na Eq. (3.182), obtemos que

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2i\mu_x}{\mu} k_y \frac{d\phi}{dx} + \left(\frac{2E\mu_x}{\hbar^2} - \frac{k_y^2 \mu_x}{\mu_y} - \frac{2V\mu_x}{\hbar^2} \right) \phi = 0. \quad (3.186)$$

Note que até o momento ainda não tínhamos falado sobre o tipo de potencial que estavamos tratando, então o Hamiltoniano da Eq. (3.180) e o da Eq. (3.186) são equações para um potencial $V(x')$ rotacionado com um ângulo qualquer. Agora se considerarmos uma região de potencial do tipo linear, dado por $V = Fex$, podemos definir a seguinte variável

$$z = \frac{2E\mu_x}{\hbar^2} - \frac{k_y^2 \mu_x}{\mu_y} - \frac{2V\mu_x}{\hbar^2}, \quad (3.187)$$

com diferenciável dado por

$$dz = -\frac{2Fe\mu_x}{\hbar^2} dx. \quad (3.188)$$

Aplicando na Eq. (3.186), obtemos

$$\partial_z^2 \phi + \alpha \partial_z \phi + \beta z \phi = 0, \quad (3.189)$$

onde

$$\alpha = -\frac{4i\mu_x^2 F^2 e^2}{\mu \hbar^4} k_y, \quad (3.190a)$$

$$\beta = \frac{4F^2 e^2 \mu_x^2}{\hbar^4}. \quad (3.190b)$$

Para resolver a nova equação diferencial dada pela Eq. (3.189), iremos considerar que a função de onda pode ser escrita como

$$\phi = v(z)w(z). \quad (3.191)$$

Analisando a primeira e segunda derivada da Eq. (3.191), temos

$$\frac{d\phi}{dz} = v \frac{dw}{dz} + \frac{dv}{dz} w, \quad (3.192a)$$

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = v \frac{d^2w}{dz^2} + \frac{dv}{dz} \frac{dw}{dz} + \frac{d^2v}{dz^2} w + \frac{dv}{dz} \frac{dw}{dz}, \quad (3.192b)$$

e aplicando na Eq. (3.189), temos que

$$v \frac{d^2w}{dz^2} + \frac{dv}{dz} \frac{dw}{dz} + \frac{d^2v}{dz^2} w + \frac{dv}{dz} \frac{dw}{dz} + \alpha \left(v \frac{dw}{dz} + \frac{dv}{dz} w \right) + \beta z v w = 0. \quad (3.193)$$

Reorganizando os termos, obtemos que

$$\frac{d^2v}{dz^2} w + \left(2 \frac{dw}{dz} + \alpha w \right) \frac{dv}{dz} + \left(\frac{d^2w}{dz^2} + \alpha \frac{dw}{dz} + \beta z w \right) v = 0. \quad (3.194)$$

Rescrevendo-a da seguinte forma:

$$2 \frac{dw}{dz} + \alpha w = 0, \quad (3.195)$$

temos que a solução é dada por

$$w = e^{-\frac{1}{2} \int \alpha dx} = e^{\frac{1}{2} \alpha x}. \quad (3.196)$$

Aplicando-a na Eq. (3.194), temos

$$\frac{d^2v}{dz^2} - \left(\beta z - \frac{1}{4} \alpha^2 \right) v = 0. \quad (3.197)$$

Definindo uma nova variável η , dada por

$$\eta = \beta z - \frac{1}{4} \alpha^2, \quad (3.198)$$

com diferenciando dado por

$$\partial \eta = \beta \partial z, \quad (3.199)$$

e substituindo-os na Eq. (3.197), obtêm-se que

$$\partial_\eta^2 v - \beta^2 \eta v = 0. \quad (3.200)$$

Note que se

$$\eta = \beta^{-\frac{2}{3}} l, \quad (3.201)$$

obtêm-se que

$$\partial_z^2 v - lv = 0. \quad (3.202)$$

Essa equação diferencial ordinária possui soluções bastante conhecidas, dadas pelas equações de Airy na forma

$$\phi(x) = e^{-\frac{1}{2}\alpha x} \left[aA_i(\beta^{2/3}(\beta z - \frac{1}{4}\alpha^2)) + bB_i(\beta^{2/3}(\beta z - \frac{1}{4}\alpha^2)) \right]. \quad (3.203)$$

3.5.1 Caso de uma barreira de potencial linear anisotrópico

Nesta seção iremos estudar o caso de uma barreira de potencial linear, conhecida também como barreira triangular. Para entendermos melhor o problema iremos admitir três regiões, sendo: antes do potencial (1), no interior do potencial (2) e depois do potencial (3).

Usando a condição de continuidade nas regiões (1) e (2), dadas por

$$\psi_2(x_1) = \psi_1(x_1), \quad (3.204a)$$

$$v_g \psi_2(x_1) = v_g \psi_1(x_1), \quad (3.204b)$$

obtemos desta última que

$$\frac{d\psi_2}{dx}(x_1) = \frac{d\psi_1}{dx}(x_1). \quad (3.205)$$

Dessa forma podemos construir a matriz

$$\begin{pmatrix} \psi_2(x_1) \\ \frac{d\psi_2}{dx}(x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(x_1) \\ \frac{d\psi_1}{dx}(x_1) \end{pmatrix}. \quad (3.206)$$

Explicitando as funções de onda, encontra-se que

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}\alpha x_1} [a_2 A_i(\xi(x_1)) + b_2 B_i(\xi(x_1))] \\ e^{-\frac{1}{2}\alpha x_1} \left[a_2 \left(\frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_1)) + \frac{dA_i}{dx} \right) + b_2 \left(\frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_1)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_1)) \right) \right] \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{ik_1^+ x_1} a_1 + e^{ik_1^- x_1} b_1 \\ k_1^+ e^{ik_1^+ x_1} a_1 + k_1^- e^{ik_1^- x_1} b_1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.207)$$

de forma que podemos fazer

$$\begin{pmatrix} e^{ik_1^+ x_1} & e^{ik_1^- x_1} \\ k_1^+ e^{ik_1^+ x_1} & k_1^- e^{ik_1^- x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = e^{-\frac{1}{2}\alpha x_1} \\ \times \begin{pmatrix} A_i(\xi(x_1)) & B_i(\xi(x_1)) \\ \left(\frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_1)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_1))\right) & \left(\frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_1)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_1))\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (3.208)$$

onde

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\alpha x_1}}{D_1} \begin{pmatrix} k_1^- e^{ik_1^- x_1} & -e^{ik_1^- x_1} \\ -k_1^+ e^{ik_1^+ x_1} & e^{ik_1^+ x_1} \end{pmatrix} \quad (3.209)$$

$$\times \begin{pmatrix} A_i(\xi(x_1)) & B_i(\xi(x_1)) \\ \left(\frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_1)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_1))\right) & \left(\frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_1)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_1))\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.210)$$

Agora, iremos usar as mesmas condições de contorno das Eqs. (3.204a) e (3.205) para $x = x_2$, ou seja, as condições para as regiões (2) e (3). Neste caso devemos obter a matriz

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \frac{e^{\frac{1}{2}\alpha x}}{D_2} \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_2)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_2))\right) e^{ik_3^+ x_2} - k_3^+ e^{ik_3^+ x_1} B_i(\xi(x_1)) \\ \left(\frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_2)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_2))\right) e^{ik_3^+ x_2} - k_3^+ e^{ik_3^+ x_3} A_i(\xi(x_3)) \\ \left(\frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_2)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_2))\right) e^{ik_3^- x_2} - k_3^- e^{ik_3^- x_2} B_i(\xi(x_2)) \\ \left(\frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_3)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_3))\right) e^{ik_3^- x_2} - k_3^- e^{ik_3^- x_2} A_i(\xi(x_2)) \end{pmatrix}. \quad (3.211)$$

Substituindo as matrizes e resolvendo o produto, o coeficiente de transmissão é encontrado como

$$T = \left| \frac{(k_1^- A_i(\xi(x_1)) - w_1)(w_2 - k_3^- B_i(\xi(x_2))) + (k_1^- B_i(\xi(x_1)) - w_2)(w_4 - k_3^+ A_i(\xi(x_2))))}{w_4 A_i(\xi(x_2)) - w_3 B_i(\xi(x_2)) (k_1^- - k_1^+)} \right|^{-2}, \quad (3.212)$$

onde

$$w_1 = \frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_1)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_1)), \quad (3.213a)$$

$$w_2 = \frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_1)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_1)), \quad (3.213b)$$

$$w_3 = \frac{1}{2}\alpha A_i(\xi(x_2)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(x_2)), \quad (3.213c)$$

$$w_4 = \frac{1}{2}\alpha B_i(\xi(x_2)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(x_2)). \quad (3.213d)$$

3.5.2 Estados Ligados

Nesta seção estudaremos os estados ligados considerando a identidade de Chebyshev, onde partiremos da matriz de transferência convencional e definiremos a origem como $x_1 = 0$, tal que:

$$N = \begin{pmatrix} \left[\left(\frac{1}{2}\alpha - k^+ \right) B_i(\xi(0)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(0)) \right] \left[\left(k^- e^{k^-l} - \frac{1}{2}\alpha \right) A_i(\xi(l)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(l)) \right] \\ \left[\left(k^+ - \frac{1}{2}\alpha \right) A_i(\xi(0)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(0)) \right] \left[\left(\frac{1}{2} - k^+ e^{k^+l} \alpha \right) A_i(\xi(l)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(l)) \right] \\ \left[\left(\frac{1}{2}\alpha - k^- \right) B_i(\xi(0)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(0)) \right] \left[\left(k^- e^{k^-l} - \frac{1}{2}\alpha \right) B_i(\xi(l)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(l)) \right] \\ \left[\left(k^- - \frac{1}{2}\alpha \right) A_i(\xi(0)) + \frac{dA_i}{dx}(\xi(0)) \right] \left[\left(\frac{1}{2} - k^+ e^{k^+l} \alpha \right) B_i(\xi(l)) + \frac{dB_i}{dx}(\xi(l)) \right] \end{pmatrix}, \quad (3.214)$$

onde usamos a seguinte relação

$$M = \begin{pmatrix} e^{iq_l} & 0 \\ 0 & e^{-iq_l} \end{pmatrix} N. \quad (3.215)$$

Para n barreiras, temos que

$$M^n = \begin{pmatrix} M_{11}U_{n-1} - U_{n-1} & M_{12}U_{n-1} \\ M_{21}U_{n-1} & M_{22}U_{n-1} - U_{n-2} \end{pmatrix} N, \quad (3.216)$$

onde

$$U_n = \frac{\sin(n+1)ql}{\sin ql}. \quad (3.217)$$

Sabemos que para calcular os estados ligados para uma barreira, devemos tomar

$$M_{22}(k = ik) = 0. \quad (3.218)$$

Considerando as n barreiras idênticas, $M_{22}^n = 0$ que corresponde

$$\begin{aligned} & \left[\left(k^- - \frac{1}{2}\alpha \right) A_i(\xi)|_{x=0} + \frac{dA_i(\xi)}{dx} \Big|_{x=0} \right] \left[\left(\frac{1}{2} - k^+ e^{k^+l} \alpha \right) B_i(\xi)|_{x=l} + \frac{dB_i(\xi)}{dx} \Big|_{x=l} \right] \\ & = \frac{\sin(n-1)ql}{\sin nql}. \end{aligned} \quad (3.219)$$

3.5.3 Múltiplas barreiras de potencial linear

Nesta seção iremos apresentar o caso anisotrópico para o potencial linear e calcular a transmissão eletrônica através de múltiplas barreiras lineares. Usando os resultados para a função de onda encontrados na seção anterior, temos que

$$\phi(x) = e^{-\frac{1}{2}\alpha x} [a_2 A_i(\xi(x)) + b_2 B_i(\xi(x))]. \quad (3.220)$$

Definindo

$$G_i = A_i(\xi(x))e^{\frac{1}{2}\alpha x}, \quad (3.221)$$

e

$$H_i = B_i(\xi(x))e^{\frac{1}{2}\alpha x}, \quad (3.222)$$

com

$$\xi(x) = \beta^{2/3}(\beta z - \frac{1}{4}\alpha^2), \quad (3.223)$$

temos então que

$$\frac{d\psi}{dx}(x) = a_2 \frac{dG_i^2}{dx} + b_2 \frac{dH_i^2}{dx}. \quad (3.224)$$

Na primeira região, temos

$$\psi_1 = a_1 G_i^1 + b_1 H_i^1, \quad (3.225)$$

em que podemos definir

$$G_i^1 = e^{ik^+x}, \quad (3.226)$$

e

$$H_i^1 = e^{ik^-x}, \quad (3.227)$$

ou seja, de maneira geral podemos escrever

$$\psi_j = a_j G_i^j + b_j H_i^j, \quad (3.228)$$

e

$$\frac{d\psi_j}{dx}(x) = a_2 \frac{dG_i^j}{dx} + b_2 \frac{dH_i^j}{dx}, \quad (3.229)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} \psi_j \\ \frac{d\psi_j}{dx}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_i^j & H_i^j \\ \frac{dG_i^j}{dx} & \frac{dH_i^j}{dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}, \quad (3.230)$$

ou

$$\begin{pmatrix} \psi_j(x) \\ \frac{d\psi_j}{dx}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_i^j & B_i^j \\ \frac{1}{2}\alpha A_i^j + \frac{dA_i^j}{dx} & \frac{1}{2}\alpha B_i^j + \frac{dB_i^j}{dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}\alpha x} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}\alpha x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}, \quad (3.231)$$

em que definiremos as matrizes M_j e S_j tal como

$$\begin{pmatrix} \Psi_j(x) \\ \frac{d\Psi_j}{dx}(x) \end{pmatrix} = S_j M_j \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}, \quad (3.232)$$

onde

$$S_j = \begin{pmatrix} A_i^j(\xi(X)) & B_i^j(\xi(x)) \\ \frac{1}{2}\alpha A_i^j(\xi(x)) + \frac{dA_i^j}{dx}(\xi(x)) & \frac{1}{2}\alpha B_i^j(\xi(x)) + \frac{dB_i^j}{dx}(\xi(x)) \end{pmatrix}, \quad (3.233)$$

e

$$M_j = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}\alpha x} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}\alpha x} \end{pmatrix}. \quad (3.234)$$

Aplicando as condições de contorno

$$\Psi_j(x_{j-1}) = \Psi_{j-1}(x_{j-1}), \quad (3.235)$$

e

$$v_g \Psi_j = v_g \Psi_{j-1}. \quad (3.236)$$

onde

$$\begin{pmatrix} \Psi_j(x_{j-1}) \\ \frac{d\Psi_j}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{j-1}(x_{j-1}) \\ \frac{d\Psi_{j-1}}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.237)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} = N_j \begin{pmatrix} a_{j-1} \\ b_{j-1} \end{pmatrix}. \quad (3.238)$$

Definimos

$$N_j = S_j^{-1} M_j^{-1} S_{j-1} M_{j-1}, \quad (3.239)$$

de forma que

$$\begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad (3.240)$$

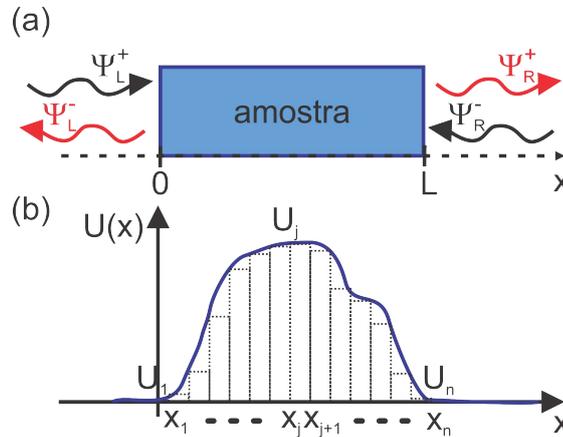
onde

$$N = N_j N_{j-1} \dots N_2, \quad (3.241)$$

e a transmissão é dada por

$$T = \left| \frac{\det(N)}{N_{22}} \right|^2. \quad (3.242)$$

Figura 29 – (a) Esquema de um típico experimento de espalhamento. As ondas Ψ_L^+ e Ψ_R^- são espalhadas pela amostra, caracterizada pelo potencial $U(x)$, enquanto que as ondas Ψ_L^- e Ψ_R^+ consistem nas ondas refletidas e transmitidas, respectivamente, através da amostra. (b) Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma sequência de barreiras a ser considerado no método da matriz de transferência.



Fonte: Elaborado pelo autor

3.6 Barreira de potencial qualquer

Nesta seção iremos aplicar o método da matriz de transferência para uma região de potencial qualquer como esta sendo apresentado na Fig. 29. A ideia consiste basicamente em estabelecer uma relação entre as amplitudes das ondas antes da região de espalhamento e depois da região de espalhamento (MARKOŠ; SOUKOULIS, 2008). Tal método pode ser usado para analisar a propagação de ondas de partículas quânticas, ondas eletromagnéticas, ondas acústicas, ondas elásticas, dentre outras. A ideia consiste em aproximar um potencial contínuo suave por uma sequência de barreiras quadradas, de forma que a aproximação será tão melhor quanto mais estreitas forem as barreiras. A Fig. 29(b) ilustra tal discretização espacial e aproximação das pequenas regiões e potenciais quadrados com alturas fixas em cada pequena região. Observe que a região delimitada por x_j e x_{j+1} possui o potencial constante e igual à $U_j = V(x_j)$, ou seja, temos múltiplas barreiras de potenciais que juntos formam o potencial da Fig. 29. Ainda devo resaltar que iremos considerar um sistema anisotrópico com eixos arbitrariamente orientados, onde consideraremos uma rotação de eixos com ângulo α , em que podemos obter a função de onda para uma barreira de potencial rotacionado utilizando a Eq. (3.186). Note que ao considerarmos um potencial constante, a solução da equação diferencial ordinária na Eq. (3.186) é dada por $e^{ik_x x'}$, onde podemos obter

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_x} k_x'^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_x'^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu_y} k_y'^2 = E - V. \quad (3.243)$$

Resolvendo a equação de segundo grau

$$k^\pm = \beta \pm \gamma, \quad (3.244)$$

definindo

$$\beta = -\frac{\mu_x}{\mu} k_{y'}, \quad (3.245a)$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2(E - V_0)\mu_x}{\hbar^2} + \left(\frac{\mu_x^2}{\mu^2} - \frac{\mu_x}{\mu_y}\right) k_{y'}^2}. \quad (3.245b)$$

Agora utilizando esse resultado e escrevendo uma função de onda geral para cada região do potencial da Fig. 29, iremos obter

$$\varphi_j(x) = A_j e^{ik_{x1}^j x} + B_j e^{ik_{x2}^j x} = e^{i\beta_j x} (A_j e^{i\gamma_j x} + B_j e^{-i\gamma_j x}). \quad (3.246)$$

Dessa forma, devemos derivar a função de onda para obter

$$\frac{d\varphi_j}{dx} = i(\beta_j + \gamma_j) e^{i\gamma_j x} + i(\beta_j - \gamma_j) e^{-i\gamma_j x}. \quad (3.247)$$

Perceba que podemos agrupar as Eqs. (3.246) e (3.247) e obter o seguinte sistema matricial

$$\begin{pmatrix} \varphi_j(x) \\ \frac{d\varphi_j}{dx}(x) \end{pmatrix} = G_j(x) M_j(x) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (3.248)$$

onde

$$G_j(x) = \begin{pmatrix} e^{i\beta x} & e^{i\beta x} \\ ie^{i\beta x}(\beta + \gamma_j) & ie^{i\beta x}(\beta - \gamma_j) \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad M_j(x) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_j x} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma_j x} \end{pmatrix}. \quad (3.249)$$

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

$$\begin{pmatrix} \varphi_j(x_{j-1}) \\ \frac{d\varphi_j}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{j-1}(x_{j-1}) \\ \frac{d\varphi_{j-1}}{dx}(x_{j-1}) \end{pmatrix}. \quad (3.250)$$

Assim, somos capazes de relacionar os coeficientes das funções de onda das duas regiões, tal como

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = N_j \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (3.251)$$

onde a matriz N_j é dada por

$$N_j = M_j^{-1}(x_{j-1})G_j^{-1}(x_{j-1})G_{j-1}(x_{j-1})M_{j-1}(x_{j-1}). \quad (3.252)$$

Repetindo tal procedimento para as várias regiões, podemos então obter a seguinte relação entre os coeficientes de entrada e saída das funções de onda incidente e transmitidas:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = N_N N_{N-1} \dots N_2 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.253)$$

Assim podemos afirmar que dado uma rede de barreiras de potencial iremos ser capazes de associar os coeficientes da função de onda antes da primeira barreira com o da n -ésima. Desenvolvendo ainda cada termo da matriz de transferência, iremos obter as seguintes relações:

$$G_j^{-1}(x_{j-1}) = \frac{ie^{-i\beta_j x_{j-1}}}{2\gamma_j} \begin{pmatrix} (\beta_j - \gamma_j) & -i \\ (\beta_j + \gamma_j) & i \end{pmatrix}, \quad (3.254a)$$

$$M_j^{-1}(x_{j-1}) = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma_j x_{j-1}} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma_j x_{j-1}} \end{pmatrix}, \quad (3.254b)$$

$$N_j = \frac{e^{-i\beta_j x_{j-1}}}{2\gamma_j} \begin{pmatrix} (\gamma_j + \gamma_{j-1})e^{-i(\gamma_j - \gamma_{j-1})x_{j-1}} & (\gamma_j - \gamma_{j-1})e^{-i(\gamma_j + \gamma_{j-1})x_{j-1}} \\ (\gamma_j - \gamma_{j-1})e^{i(\gamma_j + \gamma_{j-1})x_{j-1}} & (\gamma_j + \gamma_{j-1})e^{i(\gamma_j - \gamma_{j-1})x_{j-1}} \end{pmatrix}. \quad (3.254c)$$

Em geral, podemos ver que esse método é capaz de reduzir o problema à um solução de uma única equação matricial, mas em compensação devemos trabalhar com um produtório de matrizes que, em muitos casos, só pode ser calculado numericamente. É interessante ainda notar que o potencial pode ter qualquer formato, sendo os resultados mais precisos quanto menor for a largura dos potenciais menores discretizados U_i . Isso significa que podemos fazer esse método para barreiras quadradas espaçadas, para barreiras triangulares ou qualquer outra forma que desejarmos, também podemos utilizar esse método para estudar as propriedades eletrônicas de vários materiais como o grafeno ou fosforeno, calculando sua condutância, transmissão ou reflexão (ZHAN *et al.*, 2013; LI *et al.*, 2009).

3.7 Resultados e Discussões

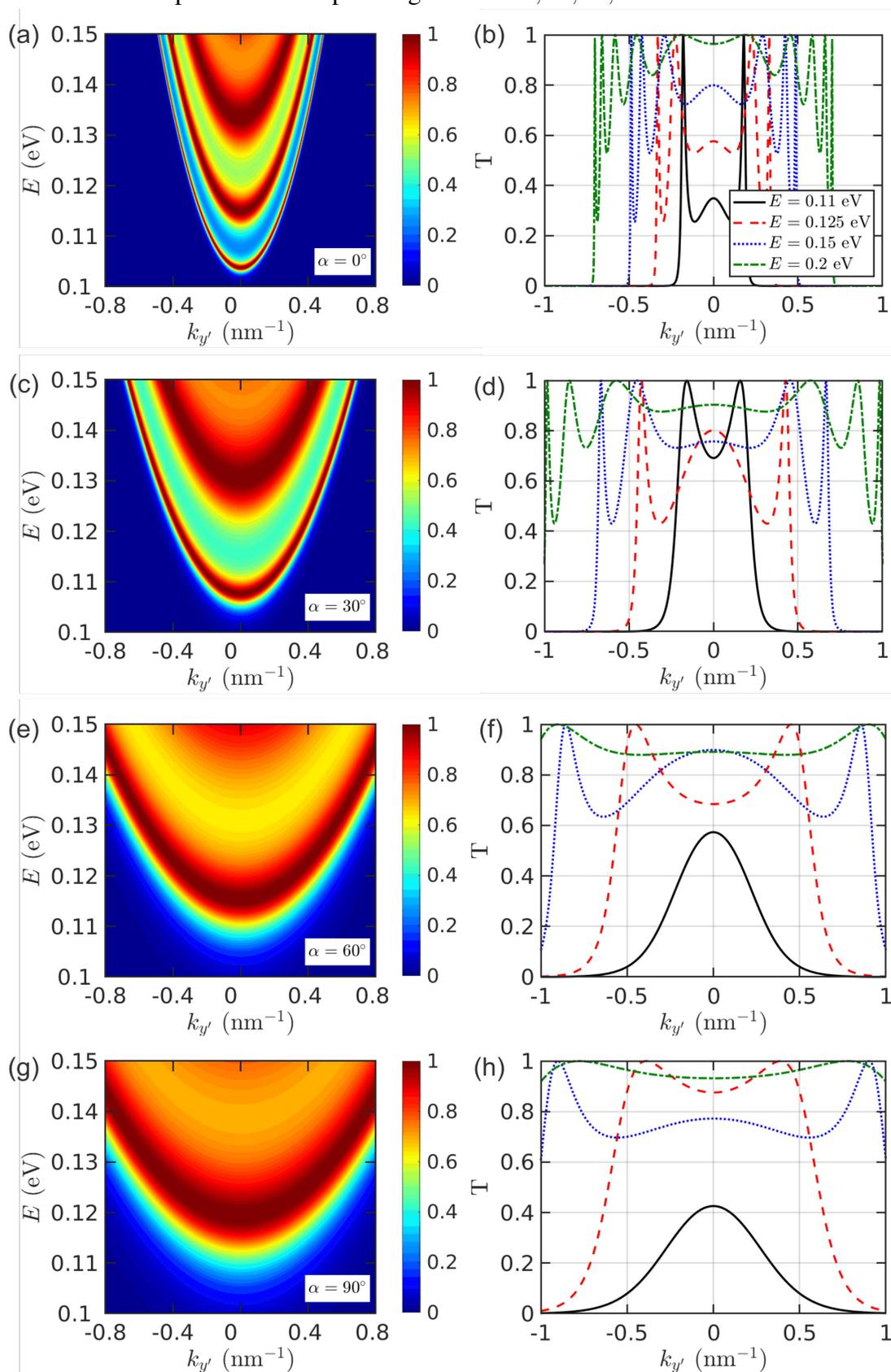
Nesta seção iremos discutir sobre os resultados obtidos a partir do Capítulo 3, utilizando o método da matriz de transferência para um sistema anisotrópico de múltiplas barreiras de potenciais, nas quais consideraremos os várias direções cristalográficas para analisarmos o papel da anisotropia no transporte eletrônico.

Através da Fig. 30 podemos observar alguns dos resultados obtidos neste capítulo para uma barreira de potencial para diferentes incidências k'_y . Note nos painel da esquerda que temos as curvas de contorno que nos apresenta os valores de transmissão para ângulos α diferentes, na qual podemos retirar uma linha horizontal do gráfico e ver que a transmissão eletrônica possui diferentes valores de transmissão dependendo da direção do ângulo de incidência que está associado com k'_y para direções fixas de α , onde ao aumentarmos os valores de α veremos que isso reflete diretamente no número de picos de transmissão, consequência da anisotropia do sistema que possui massas distintas para diferentes direções cristalográficas. Ainda podemos observar que a transmissão eletrônica muda o número de picos de transmissão para diferentes retas verticais tomadas dos painéis da esquerda, devido aos níveis de energia permitidos do potencial.

Agora ao analisarmos a Fig. 31 podemos observar alguns dos resultados obtidos para uma barreira de potencial com incidência normal $k_y = 0$. No painel (b) está sendo apresentado um gráfico de curvas de nível de energia da transmissão para diferentes direções cristalográficas, é possível observar, tomando-se uma linha vertical, ou seja, considerando um ângulo fixo, que iremos obter picos de transmissão cada vez mais espaçados ao tornarmos o valor de energia cada vez maior, isso está associado aos níveis de energia permitidos no poço de potencial. Podemos observar melhor este comportamento ao analisarmos o painel (c), na qual é apresentado quatro plots de transmissão eletrônica em função da energia para quatro ângulos fixos, onde podemos ver exatamente esse comportamento dos picos de transmissão cada vez mais espaçados e ao comparar com os vários ângulos para uma mesma faixa de energia (0,1 eV a 0,2 eV), podemos notar para $\alpha = 0^\circ$ iremos ter cinco picos, para $\alpha = 30^\circ$ teremos três picos, para $\alpha = 60^\circ$ teremos dois picos e para $\alpha = 90^\circ$ iremos ter também dois picos um pouco mais espaçados. Portanto podemos observar uma variação no número de picos de energia como consequência da anisotropia na massa para as direções diferentes, tendo direções.

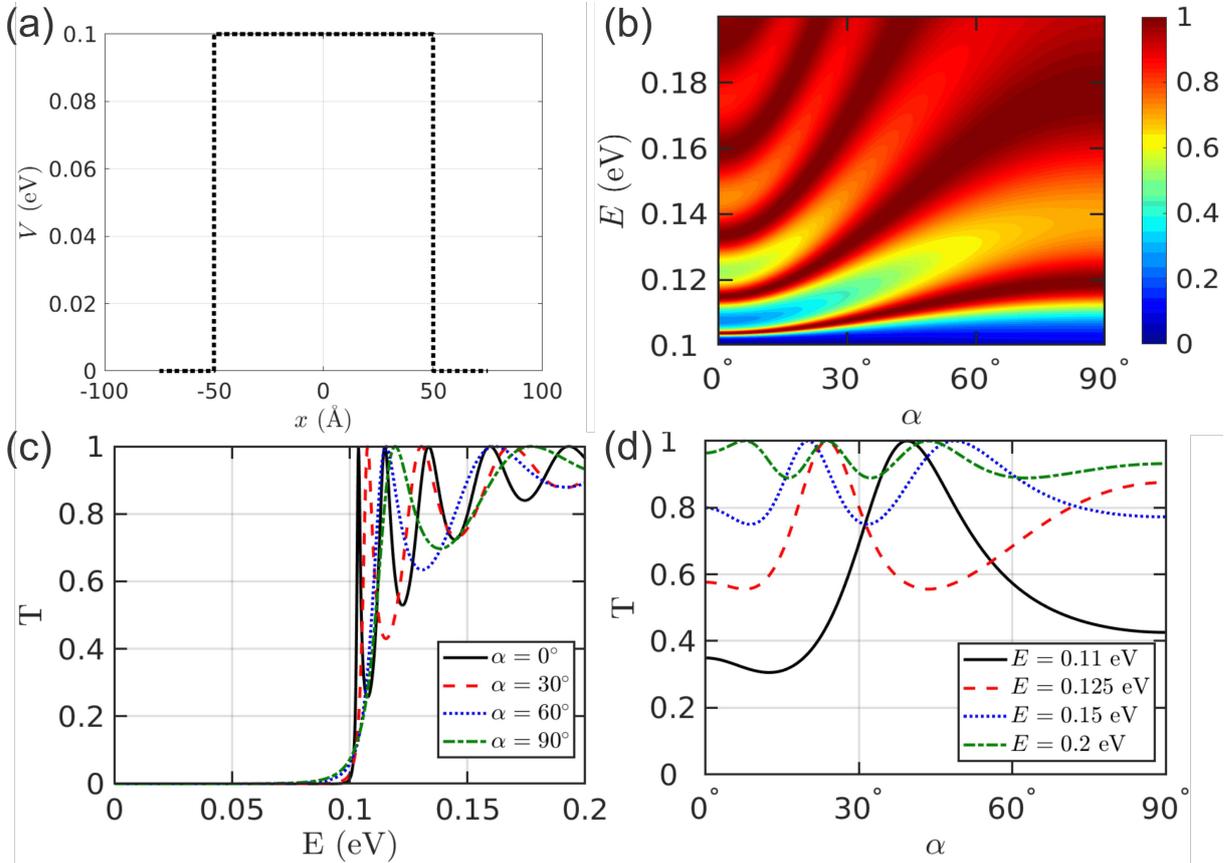
Podemos também verificar as transmissões dos resultados anteriores, considerando diferentes larguras para o potencial, como está sendo apresentado na Fig. 32. Na qual é mostrado

Figura 30 – Resultados para a transmissão eletrônica considerando diferentes direções de incidência, onde os painéis da esquerda são as curvas de contorno e os da direita são obtidas tomando uma reta horizontal dos gráficos de contorno. Os pares de painéis de cima para baixo são para ângulos $\alpha = 0, 30, 60, 90^\circ$.



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 31 – (a) Curva de contorno de energia para a transmissões em diferentes direções cristalográficas α com angulo de incidência normal k_y . (b) Transmissão em função da energia para ângulos fixos, referente a uma linha vertical do painel (a). (c) Transmissão em função do ângulo para energias fixas, referente a uma reta horizontal do painel (a). (d) Plote do tipo de potencial considerada no problema.

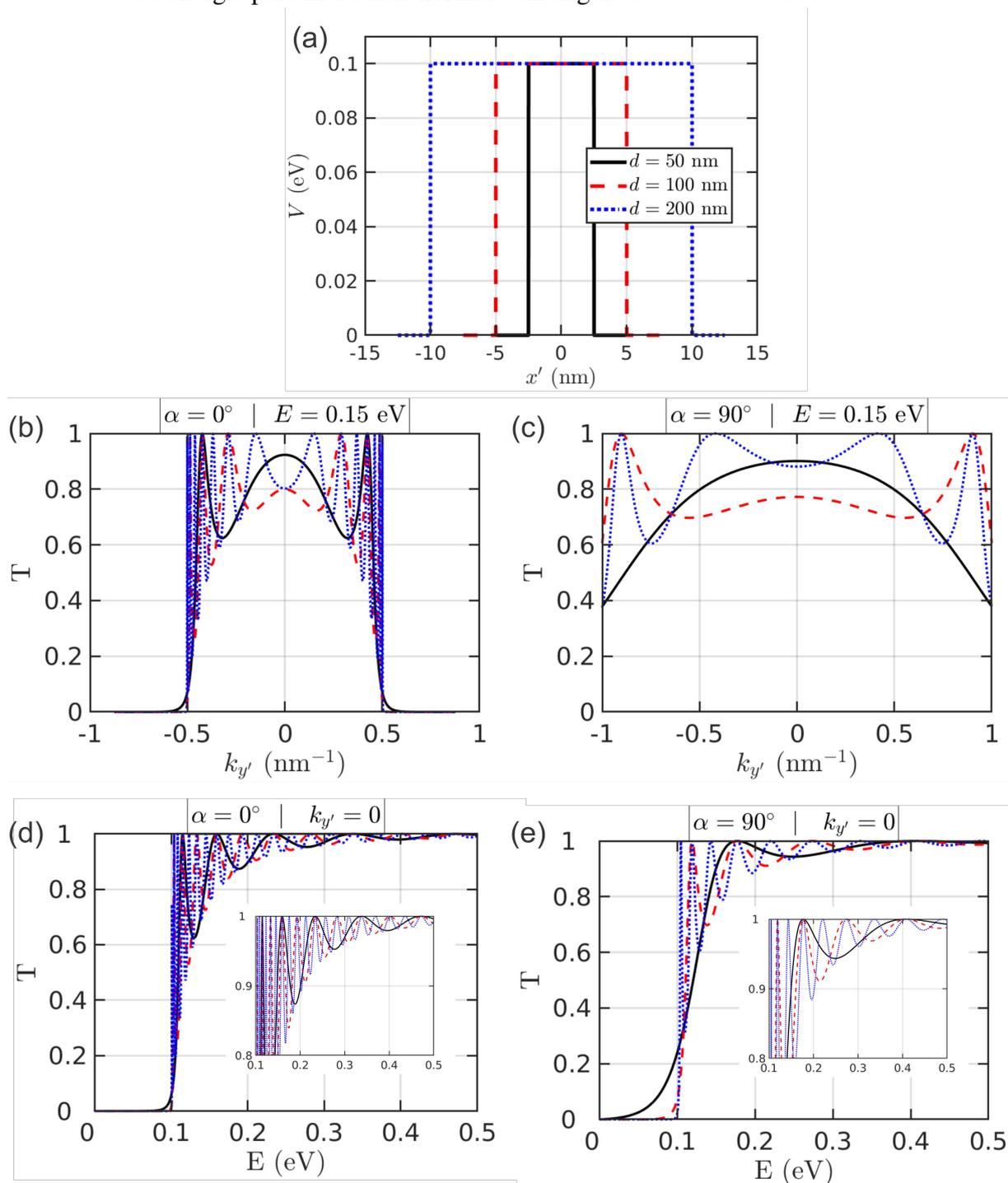


Fonte: Elaborado pelo autor

os gráficos de linha para as direções cristalográficas $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$, onde o painel (a) apresenta o potencial para larguras $d = 50$ nm, $d = 100$ nm e $d = 200$ nm. Quanto ao painel (b) e (c) devemos observar que ao aumentarmos a largura do potencial iremos reduzir o número de picos de transmissão devido a uma mudança nos níveis de energia permitido. Em relação aos painéis (d) e (e) que mostra a transmissão em função da energia, iremos ter os picos cada vez mais próximos para maiores largura do potencial.

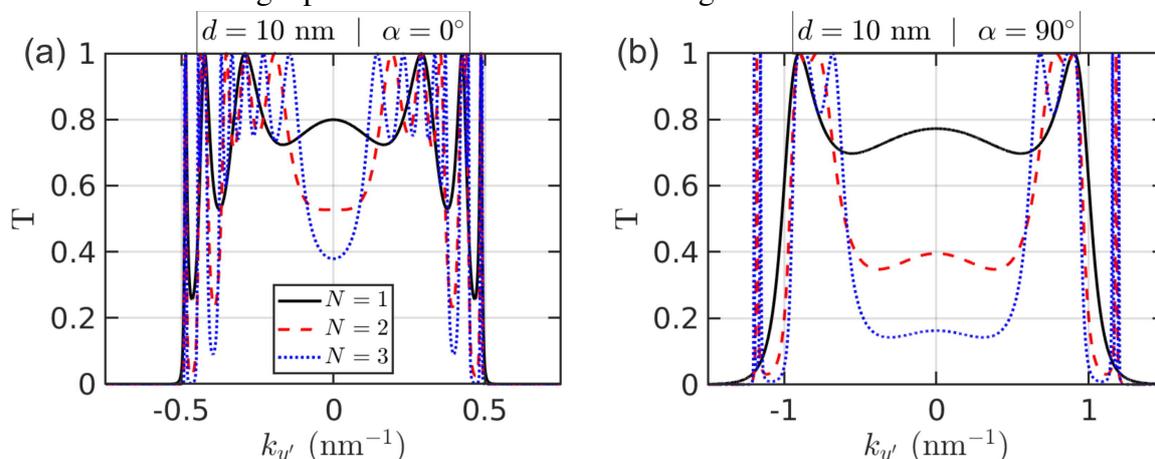
Agora fazendo o número de barreiras aumentar para diferentes direções de rotação no sistema de eixos, como mostrado na Fig. 33, na qual mostra a transmissão em função de k_y para uma largura fixa do potencial em ambos os painéis. Podemos ver que para o painel (a) e (b) ocorre uma variação no número de picos de transmissão quando aumentamos o número barreiras de potencial, onde podemos notar que na direção $\alpha = 0^\circ$ possuem uma melhor capacidade de transporte do que na direção cristalográfica de $\alpha = 90^\circ$, isso fica bastante evidente quando olhamos o painel com $N = 10$ barreiras, na qual a transmissão assume uma faixa bastante

Figura 32 – (a) Barreiras de potenciais com larguras $d = 50$ nm, $d = 100$ nm e $d = 200$ nm. (b) e (c) A transmissão eletrônica para diferentes ângulos de incidências associado ao k_y , considerando diferentes direções cristalográficas. (d) e (e) Transmissão em função da energia para incidência normal com ângulo $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$.



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 33 – (a) Barreiras de potenciais com larguras $d = 50$ nm, $d = 100$ nm e $d = 200$ nm. (b) e (c) A transmissão eletrônica para diferentes ângulos de incidências associado ao k_y , considerando diferentes direções cristalográficas. (d) e (e) Transmissão em função da energia para incidência normal com ângulo $\alpha = 0^\circ$ e $\alpha = 90^\circ$.

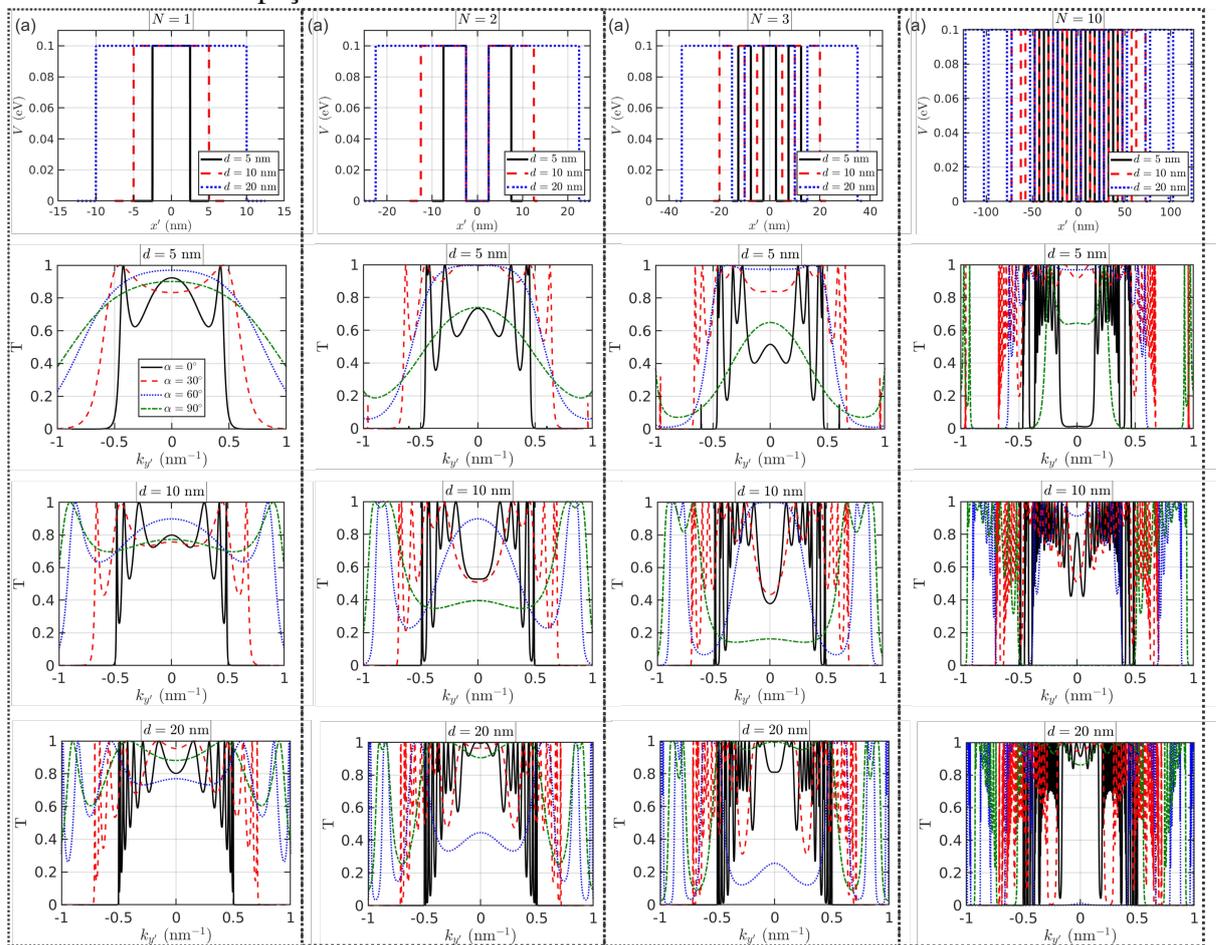


Fonte: Elaborado pelo autor

considerável de transmissão eletrônica. Devo ressaltar que em todas as figuras que relaciona as direções cristalográficas com a transmissão, a direção com a maior capacidade de transporte é para $\alpha = 90^\circ$ que está relacionado com a massa do elétron, que neste caso é a massa $m_y = 0,856m_0$, tendo um valor maior que a direção $m_x = 0,166m_0$ (SOUSA, 2018). Se uma partícula na direção x tem massa menor que na direção y e ambas têm a mesma energia, então a diferença deve ser a velocidade das partículas que neste caso seria maior para a massa menor m_x , refletindo diretamente na capacidade de transporte.

Se também analisarmos o comportamento da transmissão em função do número de barreiras como mostrado no painel, em uma mesma linha, da esquerda para direita da Fig. 34. Veja que iremos observar um aparecimento de maior número de picos de transmissão total. Esse acréscimo também ocorre quando aumentamos a largura das barreiras, como podemos observar ao olharmos a mudança dos painéis, em uma mesma coluna, de cima para baixo. Podemos explicar este comportamento pelo motivo de que ao aumentamos a largura de uma barreira, estamos aumentando o número de estados permitidos e consequentemente aumentando a probabilidade de uma partícula ser transmitida.

Figura 34 – Resultados para a transmissão eletrônica em função de k_y e os diferentes potenciais usados, onde a primeira linha de plots mostram a forma da barreira de potencial e o número de barreiras usadas e os painéis a partir da segunda linha da esquerda para direita mostram a transmissões para $N = 1, 2, 3$ e 10 barreiras de potenciais variando a largura da barreira em $d = 5, 10$ e 20 nm. Fixou-se a energia como sendo $E = 0, 15$ eV e espaçamento de $L = 5$ nm.



Fonte: Elaborado pelo autor

4 APLICAÇÃO DO MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN NO TRANSPORTE ELETRÔNICO

4.1 Propagador de Evolução Temporal e a função de Green

Enquanto o método da matriz de transferência ou de espalhamento se refere a uma relação entre os *leads* devido a excitação em um *lead* em relação ao outro, a função de Green nos dá uma relação mais forte, pois nos permite relacionar um ponto de excitação com um outro qualquer (Datta, 1997) dentro dos próprios *leads*. Em geral, nos capítulos anteriores consideramos apenas os casos de transporte não interagente, de forma que levamos em consideração as excitações causadas pelas ondas de incidência, onde podemos estabelecer uma relação direta entre a matriz de espalhamento e a função de Green que veremos nas seções posteriores. Além disso, o método da função de Green é bastante útil para casos de sistemas de níveis discretos e moleculares.

Na seção seguinte, iremos apresentar o método da função de Green geral e definir dois operadores chamados de “propagadores” que são duas possíveis soluções para a função de Green conhecidas como retardada G^R e avançada G^A . Inicialmente consideraremos o estudo do transporte não interagente, sendo importante para calcular a matriz de espalhamento de maneira mais útil e fácil.

Primeiramente, lembraremos que ao considerarmos o Hamiltoniano independente do tempo, temos

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E|\psi_n\rangle, \quad (4.1)$$

em que $|\psi\rangle$ forma um conjunto de estados completos, ortonormais e normalizados, onde podemos escrever, para energias discretas,

$$\delta_{nm} = \langle \psi_n | \psi_m \rangle, \quad (4.2)$$

e

$$\hat{I} = \sum |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (4.3)$$

Agora iremos considerar a equação de Schrödinger dependente do tempo dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (4.4)$$

a ideia consiste em considerar um operador $\hat{U}(t, t')$, chamado de operador de evolução temporal (OET), de forma que podemos escrever

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t') |\psi(t')\rangle, \quad (4.5)$$

onde t' é um instante de tempo diferente de t .

Observem que uma solução para o OET pode ser dada por

$$\hat{U}(t, t') = e^{-i(t-t')\hat{H}/\hbar}. \quad (4.6)$$

De fato

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{i}{\hbar} e^{-i(t-t')\hat{H}/\hbar} |\psi(t')\rangle \right] \\ &= i\hbar \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 e^{-i(t-t')\hat{H}/\hbar} |\psi(t')\rangle \right] \\ &= \hat{H} |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Se considerarmos a propriedade $\hat{U} = \hat{U}\hat{I}$, então

$$\hat{U} = \frac{i}{\hbar} \sum e^{-i(t-t')E_n/\hbar} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (4.8)$$

Aplicando na Eq. (4.5), encontraremos

$$|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \sum e^{-i(t-t')E_n/\hbar} \psi_n \psi(t') |\psi_n\rangle, \quad (4.9)$$

onde o termo $\psi_n \psi(t')$ pode ser visto como um coeficiente de expansão temporal da função em t' quando posta na base dos autoestados. Isso se assemelha ao coeficiente de dilatação térmica que se caracteriza por medir a alteração do volume em um sólido. Essa equação nos possibilita identificar uma possível solução para o $|\psi(t)\rangle$, que se torna futuramente mais conveniente, dada por

$$\begin{aligned} G^R &= \theta(t-t') \hat{U}(t-t') \\ &= \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') e^{-i(t-t')\hat{H}/\hbar}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

chamada de função de Green retardada e também

$$\begin{aligned} G^A &= \theta(t'-t) \hat{U}(t'-t) \\ &= \frac{i}{\hbar} \theta(t'-t) e^{-i(t'-t)\hat{H}/\hbar}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

conhecida como função de Green avançada, onde $\theta(t'-t)$ é a função *Heaviside* definida como

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 0 & \text{se } t < t', \\ 1 & \text{se } t' < t. \end{cases} \quad (4.12)$$

Assim as funções de ondas podem assumir uma forma dependente da função de Green retardada e avançada

$$|\psi(t)\rangle = i\hbar G^R(t-t')|\psi(t')\rangle, \text{ se } t > t', \quad (4.13a)$$

$$|\psi(t)\rangle = -i\hbar G^A(t'-t)|\psi(t')\rangle, \text{ se } t' > t, \quad (4.13b)$$

onde as funções de Green satisfazem a seguinte relação

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right] G^{R(A)}(t, t') = \hat{I} \delta(t - t'). \quad (4.14)$$

Para escrevermos a função de Green em termos da energia e conseguir, posteriormente, expandí-la em termos dos autoestados, devemos utilizar a transformação de Fourier dada por

$$G^{R(A)}(E) = \lim_{n \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{-\infty} G^{R(A)}(\tau) e^{i(E)\tau/\hbar} d\tau. \quad (4.15)$$

Entretanto, devemos ver que os termos exponenciais da função de Green apresentam termos oscilatórios. Para lidarmos com este comportamento devemos adicionar um termo complexo junto a energia

$$G^{R(A)}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{-\infty} G^{R(A)}(\tau) e^{i(E \pm i\eta)\tau/\hbar} d\tau. \quad (4.16)$$

Portanto podemos usar essas ideias para deixar a nossa função de Green em termos da energia, onde a Eq. (4.14) pode ser escrita por

$$[(E + ni)I - \hat{H}] G^R(E) = \hat{I} \delta(t - t'), \quad (4.17)$$

em que

$$G^R(E) = [(E + ni)I - \hat{H}]^{-1}, \quad (4.18)$$

onde ao considerarmos a propriedade de completude na Eq. (4.3), obteremos a expansão de autoestados

$$\begin{aligned} G^R(E) &= \frac{1}{(E + ni)I - \hat{H}} \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \\ &= \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E + ni - E_n}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

É interessante observar que ao aplicarmos a transformação de Fourier inversa podemos obter

$$\begin{aligned}
G^R(\tau) &= \lim_{n \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} G^{R(A)}(E) e^{iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} \\
&= \lim_{n \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E + ni - E_n} \right) e^{iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} \\
&= \lim_{n \rightarrow 0^+} \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{e^{iE\tau/\hbar}}{E + ni - E_n} \right) \frac{dE}{2\pi\hbar} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| e^{iE_n\tau/\hbar}, \tag{4.20}
\end{aligned}$$

retornando para forma da função de Green dependente do tempo que foi definida inicialmente.

Devo ressaltar que o método considerado aqui está voltado para sistemas não interagentes, assim estamos em um sistema com transporte coerente e desconsiderando interações entre as partículas no interior do condutor.

4.2 Função de Green interagente para férmions e a equação de movimento

Nesta seção iremos discutir sobre uma forma mais generalizada da função de Green que vemos no estudo de muitos corpos, onde buscaremos apresentar a definição e retornar para o caso anterior apresentado. Uma forma mais geral para definirmos a função de Green seria utilizando um propagador de campo quântico definido por Feynman que adiciona um termo de ordenação temporal de Wick que introduz a causalidade ao sistema, sendo a função de Green para férmions definida como

$$G_{ij}^c(t, t') = -i \left\langle T \left[c(t) c^\dagger(t') \right] \right\rangle, \tag{4.21}$$

sendo esta equação que descreve a propagação do elétron, onde o operador c_j^\dagger cria um elétron em um tempo t e c_i destrói em um instante t' .

Quanto a causalidade, ela é garantida devido a utilização do operador de ordenação temporal que é definido como

$$\left\langle T \left[c(t) c^\dagger(t') \right] \right\rangle = \theta(t - t') \left\langle c(t) c^\dagger(t') \right\rangle + \theta(t' - t) \left\langle c(t) c^\dagger(t') \right\rangle. \tag{4.22}$$

Além desta definição de função de Green, ainda podemos definir outras formas que podem admitir propriedades mais diretas e úteis. Se considerarmos tempos $t > t'$ ou $t < t'$

devemos ter

$$G_{ij}^R(t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ c(t) c^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (4.23a)$$

$$G_{ij}^A(t, t') = i\theta(t' - t) \left\langle \left\{ c(t) c^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (4.23b)$$

que de maneira geral pode ser obtido ao considerarmos que não ocorre interação no interior do condutor.

Uma definição bastante comum na literatura é dado por

$$G_{ij}^R(t, t') = \left\langle \left\langle c_i; c_j^\dagger \right\rangle \right\rangle. \quad (4.24)$$

Na representação de Heisenberg, os operadores evoluem no tempo por meio da equação de Heisenberg, onde o Hamiltoniano está presente. Para um operador arbitrário \hat{O} , podemos escrever

$$i \frac{d\hat{O}}{dt} = [\hat{O}, H] + i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t), \quad (4.25)$$

onde o último termo é responsável por uma possível dependência de tempo explícita do operador.

Uma maneira de obter a função de Green é determinar sua evolução no tempo por meio da técnica de equação de movimento. Então, derivando a função de Green retardada da Eq. (4.23a) com respeito ao tempo, obtém-se

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{ij}^R(t, t') &= i(-i) \frac{\partial}{\partial t} \left[\theta(t - t') \left\langle \left\{ c_i(t), c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle \right] \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \theta(t - t') \right] \left\langle \left\{ c_i(t), c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle + \theta(t - t') \left[\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \left\{ c_i(t), c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle \right] \\ &= \delta(t - t') \delta_{ij} + \theta(t - t') \left\langle \left\{ -i\dot{c}_i(t), c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t - t') \delta_{ij} - i\theta(t - t') \left\langle \left\{ [c_i(t), H], c_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t - t') \delta_{ij} + \left\langle \left\langle [c_i(t), H]; c_j^\dagger(t') \right\rangle \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde nós usamos

- (i) a definição da função delta como a derivada da função de *Heaviside*;
- (ii) o fato de que os elétrons são férmions e, portanto, seus operadores satisfazem as relações de anticomutação $\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0$ and $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$; e
- (iii) a equação de movimento de Heisenberg para o caso em que o sistema está em equilíbrio ou, equivalentemente, o Hamiltoniano é independente do tempo:

$$i \frac{dc_i}{dt} = [c_i, H]. \quad (4.27)$$

4.2.1 Função de Green nas Coordenadas Representativas

O formalismo estabelecido anterior é a forma geral para a definição das funções de Green, onde esta seção discutirá o caso particular da função de Green independente do tempo, usando o vetor posição \mathbf{r} . Para isso, utilizaremos as seguintes regras de transição com o intuito de relacionar os estados e operadores de Dirac com os estados e operadores na representação de coordenadas ordinárias

$$\psi(r) = r\psi, \quad (4.28a)$$

$$\delta(r - r')\hat{H}(r) = \langle r | \hat{H} | r \rangle, \quad (4.28b)$$

$$G^R(r, r') = \langle r | \hat{G}^R | r \rangle, \quad (4.28c)$$

$$\sum_n \psi(r)\psi^*(r') = \delta(r - r'). \quad (4.28d)$$

Aplicando essas regras na Eq. (4.13a), podemos obter que

$$\psi(r, t) = i\hbar \int dr G(r, t, r', t') \psi(r', t'), \quad (4.29)$$

em que a função de Green retardada pode ser definida por

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] G(r, t, r', t') = \delta(r - r') \delta(t - t'). \quad (4.30)$$

Considerando o estado estacionário, iremos obter

$$[E + i\eta - H(t)] G(r, t, r', t') = \delta(r - r') \delta(t - t'), \quad (4.31)$$

correspondente a equação de Schrödinger

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.32)$$

Agora se considerarmos um elétron unidimensional, sujeito a um potencial V_0 , devemos obter as funções de Green retardada e avançada como sendo

$$[E \pm i\eta - H(t)] G(x, x', E) = \delta(x - x'), \quad (4.33)$$

cuja solução é

$$G(x - x', E) = Ae^{ik(x-x')}, \quad (4.34)$$

para $x > x'$ e

$$G(x - x', E) = Be^{-ik(x-x')}, \quad (4.35)$$

para $x < x'$, onde

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (4.36)$$

Utilizando as condições de contorno que estabelecem a igualdade dessas funções em $x = x'$

$$G(x, x')|_{x=x'+} = G(x, x')|_{x=x'-}, \quad (4.37)$$

juntamente com a descontinuidade da derivada

$$\frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \Big|_{x=x'+} - \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \Big|_{x=x'-} = \frac{2m}{\hbar}, \quad (4.38)$$

cujas soluções são dadas por

$$A = B, \quad (4.39)$$

e

$$ik[A + B] = \frac{2m}{\hbar}. \quad (4.40)$$

Resolvendo o sistema de equações, obtêm-se que

$$A = B = -\frac{im}{k\hbar^2}, \quad (4.41)$$

juntando a solução para $x > x'$ e $x < x'$, resulta em

$$G(x, x', E) = -\frac{im}{k\hbar^2} e^{ik|x-x'|}. \quad (4.42)$$

Observe que ao analisarmos a Eq. (4.32) iremos notar que ainda é cabível admitir que existe outra solução dada por

$$G(x, x', E) = \frac{im}{k\hbar^2} e^{-ik|x-x'|}, \quad (4.43)$$

ou seja, o complexo conjugado de nossa Eq. (4.42) é também solução da Eq. (4.32).

Agora, para analisarmos o comportamento das duas equações, iremos utilizar a Fig. 35. Nessa figura estamos considerando, sem perda de generalidade, que o ponto de excitação ocorre na origem do sistema de eixos $x' = 0$ em um instante $t' = 0$. De forma que podemos interpretar a Eq. (4.43), dada pela parte inferior da Fig. 35, como sendo ondas vindas do passado em direção ao ponto de excitação e a Eq. (4.42) como sendo ondas no futuro se afastando do

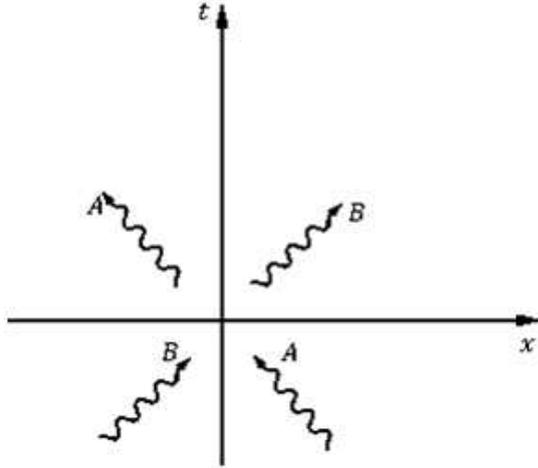


Figura 35 – Função de Green retardada e avançada para um sistema unidimensional.
Fonte: Elaborado pelo autor

ponto de excitação. Dessa maneira, fica claro que podemos interpretar a Eq. (4.42) como sendo a função de Green retardada no caso unidimensional e a Eq. (4.43) como a função de Green avançada, dadas por

$$G^R(x, x', E) = -\frac{im}{k\hbar^2} e^{ik|x-x'|}, \quad (4.44a)$$

$$G^A(x, x', E) = \frac{im}{k\hbar^2} e^{-ik|x-x'|}, \quad (4.44b)$$

em que o número de onda pode ser aproximado para

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2m(E \pm i\eta - V_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \sqrt{1 \pm \frac{i\eta}{E - V_0}} \\ &\approx \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \left(1 \pm \frac{i\eta}{2(E - V_0)} \right). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Isso mostra que o k pode ser visto como parte imaginário, onde o sinal positivo indica que a função de Green é retardada e o negativo a avançada.

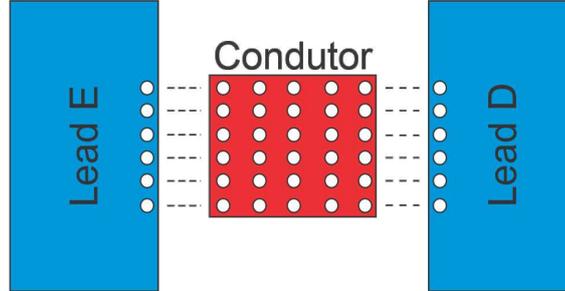
4.3 Definição da autoenergia

Na presente seção iremos apresentar o cálculo para determinar a autoenergia devido aos eletródos utilizando o conceito de função de Green. Em geral iremos considerar a existência de dois *leads* conectados a um material central formando uma nanojunção, onde consideraremos que os eletródos também são descritos pelo modelo *tight-binding* e que os eletródos estão em equilíbrio.

Na Fig. 36 podemos ver o acoplamento dos *Leads* com a região central (condutor), onde definiremos os *Leads* E e D como o lado esquerdo e direito, cujos respectivos Hamiltonianos

são H_E e H_D . Ainda definimos t_{EC} e t_{CD} , sendo os fatores de acoplamento que ligam os *leads* com a região central, em que o Hamiltoniano é definido H_C .

Figura 36 – Representação do acoplamento dos *Lead* esquerdo e direito com o condutor central.



Fonte: Elaborado pelo autor

Podemos então construir um Hamiltoniano para o sistema completo, tal como

$$H = \begin{pmatrix} H_E & t_{EC} & 0 \\ t_{CE} & H_C & t_{CD} \\ 0 & t_{DC} & H_D \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Devemos salientar que os termos dos Hamiltonianos das três regiões, juntamente aos termos de acoplamento também são matrizes. De forma que o Hamiltoniano total é composto de blocos de matrizes. Assim, se aplicarmos na Eq. (4.17), temos que

$$\begin{pmatrix} E - H_E & -t_{EC} & 0 \\ -t_{CE} & E - H_C & -t_{CD} \\ 0 & -t_{DC} & E - H_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_E & G_{EC} & 0 \\ -G_{CE} & G_C & G_{CD} \\ 0 & G_{DC} & G_D \end{pmatrix} = I. \quad (4.47)$$

Note que podemos obter as Eqs. (4.48a), (4.48b) e (4.48c) associando cada linha da matriz esquerda com a coluna central da matriz direita, isto é

$$(E - H_E)G_{EC} - t_{EC}G_C = 0, \quad (4.48a)$$

$$(E - H_C)G_C - t_{CE}G_{EC} - t_{CD}G_{DC} = I, \quad (4.48b)$$

$$(E - H_D)G_{DC} - t_{DC}G_C = 0. \quad (4.48c)$$

Note que podemos isolar G_{EC} e G_{DC} das Eqs. (4.48a) e (4.48c), tal como

$$G_{EC} = (E - H_E)^{-1}t_{EC}G_C, \quad (4.49a)$$

$$G_{DC} = (E - H_D)^{-1}t_{DC}G_C. \quad (4.49b)$$

Aplicando-as na Eq. (4.48b), tem-se que

$$-t_{CE}(E - H_E)^{-1}t_{EC}G_C + (E - H_C)G_C - t_{CD}(E - H_D)^{-1}t_{DC}G_C = I. \quad (4.50)$$

Definindo

$$\Sigma = t_{CE}(E - H_E)^{-1}t_{EC} + t_{CD}(E - H_D)^{-1}t_{DC}, \quad (4.51)$$

obtêm-se que

$$[E - H_C - \Sigma]G_C = I. \quad (4.52)$$

Portanto, a função de Green retardada para a região central deve ser dada por

$$G_C^R = [E - H_C - \Sigma^R]^{-1}. \quad (4.53)$$

Partindo da definição da Eq. (4.51), que define a autoenergia do sistema, obtemos

$$\begin{aligned} \Sigma_E^R &= t_{CE}(E - H_E)^{-1}t_{EC} \\ &= t_{CE}G_E t_{EC}, \end{aligned} \quad (4.54a)$$

e

$$\begin{aligned} \Sigma_D^R &= t_{CD}(E - H_D)^{-1}t_{DC} \\ &= t_{CD}G_D t_{DC}, \end{aligned} \quad (4.54b)$$

de maneira tal que a definição da autoenergia total definida na Eq. (4.51) pode ser escrita como sendo

$$\Sigma^R = \Sigma_E^R + \Sigma_D^R. \quad (4.55)$$

Dessa forma, tudo que precisamos para calcular as autoenergias é saber a função de Green dos *Leads* e o fator de acoplamento dos mesmos.

No caso de considerarmos a função de Green avançada, então iremos basicamente modificar $\mathbf{E} = (E - i\eta)I$ de maneira que ao compararmos com as definições anteriores, a energia se torna o complexo conjugado do caso da função de Green avançada, nos permitindo estabelecer simplesmente a relação

$$\Sigma^R = [\Sigma^A]^\dagger. \quad (4.56)$$

Em geral podemos ver que a autoenergia aparece como uma forma de interação da região central com os *Leads*, ou seja, uma partícula no interior do *Lead* central vai interpretar a existência dos *Leads* como uma adição de uma autoenergia ao sistema central. Introduzimos este termo como uma analogia ao termo utilizado para descrever interações entre elétron-elétron

ou elétrons-fônos que não está dentro do escopo para função de Green em equilíbrio, onde em nosso caso se refere a interação dos *Leads* com o condutor que se diferem por ser objetos inertes simples, enquanto as outras interações envolvem sistemas mais complicados com graus de liberdades internas.

4.4 Algumas propriedades da função de Green

4.4.1 Cálculo da Corrente

Nesta seção iremos calcular o valor da corrente, considerando um Hamiltoniano do tipo do modelo *tight binding*. Para isso iremos apresentar o cálculo de uma corrente para uma junção, onde consideramos que existe uma corrente da esquerda para direita e afirmaremos que os eletrodos estão em equilíbrio. Posteriormente definiremos a função de comprimento de nível, juntamente com a expressão para a transmissão.

Partiremos do conceito da conservação da probabilidade que deve ser dado por

$$0 = \frac{\partial \sum_i |\psi_i|^2}{\partial t}, \quad (4.57)$$

onde $\sum_i |\psi_i|^2$ é a soma no subespaço do dispositivo em questão. Considerando a mudança de notação $\psi_i = \psi_i$, obtemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \sum_i |\psi_i|^2}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial \psi_i^* \psi_i}{\partial t} \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial \psi_i^*}{\partial t} \psi_i + \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \psi_i^* \right). \end{aligned} \quad (4.58)$$

Da equação de Schrödinger

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi | H | i \rangle, \quad (4.59)$$

temos que Eq. (4.58) fica

$$0 = \sum_i (\langle \psi | H | i \rangle \psi_i^* + i \psi_i \langle \psi | H | i \rangle) = \frac{i}{\hbar} (\langle \psi | H | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | H | \psi \rangle). \quad (4.60)$$

Considerando os *kets* e *bras* como um equação matricial, é fácil notar que

$$\langle \psi | H | \psi_C \rangle = \langle \psi_1 | V_{EC} | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | H_C | \psi_C \rangle + \langle \psi_D | V - DC | \psi_C \rangle, \quad (4.61)$$

e ao se substituir na Eq. (4.60), tem-se que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \psi | (H_C + t_{EC} + t_{DC}) | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | H_C + t_{EC}^\dagger + t_{DC}^\dagger | \psi \rangle \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\left[\langle \psi_E | t_{EC} | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | t_{DC}^\dagger | \psi_E \rangle \right] + \left[\langle \psi_D | t_{EC} | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | t_{DC}^\dagger | \psi_D \rangle \right] \right). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Dessa forma, podemos definir

$$i_{j=E,D} = \langle \psi_E | t_{EC} | \psi_C \rangle + \langle \psi_C | t_{DC}^\dagger | \psi_E \rangle. \quad (4.63)$$

4.4.2 Cálculo da Transmissão

Nesta seção iremos buscar calcular a corrente percorrida através de uma junção e posteriormente determinar a transmissão eletrônica. Para isso consideraremos que os eletródos se encontram em equilíbrio e existe uma diferença de potencial t entre os mesmos.

Primeiramente devemos ver que a equação de Schrödiger deve ser determinada por

$$\begin{pmatrix} H_E & t_{EC} & 0 \\ t_{EC}^\dagger & H_C & t_{DC}^\dagger \\ 0 & t_{DC} & H_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_E \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_E \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix}. \quad (4.64)$$

No *Lead* esquerdo podemos separar a função de onda em ondas de incidência e reflexão $\psi_L = \psi_L^0 + \psi_L^1$ respectivamente, considerando que o Hamiltoniano do sistema total é H . É interessante lembrar que as funções de onda de reflexão e transmissão são resultados da interação entre os subsistemas do meio,

$$H \begin{pmatrix} \psi_E^0 + \psi_E^1 \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_E^0 + \psi_E^1 \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix}, \quad (4.65)$$

onde

$$\begin{pmatrix} E\psi_E^0 \\ t_{EC}^\dagger \psi_E^0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} E\psi_E^0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = G^{-1} \begin{pmatrix} \psi_E^1 \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix}, \quad (4.66)$$

e daí

$$\begin{pmatrix} \psi_E^1 \\ \psi_C \\ \psi_D \end{pmatrix} = G t_{EC}^\dagger \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_E^0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.67)$$

Definindo

$$G = [E - H]^{-1}, \quad (4.68)$$

e resolvendo a Eq. (4.67), obtemos que

$$\psi_C = G_C^R t_{EC}^\dagger \psi_E^0. \quad (4.69)$$

Este resultado, junto com a Eq. (4.64), resulta em

$$\Psi_D = G_{D^*} t_{DC} \Psi_C = G_{D^*} t_{DC} G_C^R t_{EC}^{\dagger} \Psi_E^0. \quad (4.70)$$

Observe que, para determinar a função de onda no primeiro contato, precisamos adicionar a onda de incidência, resultando em

$$\Psi_E = (1 + G_E^R t_{EC} G_C^R t_{EC}^{\dagger}) \Psi_E^0. \quad (4.71)$$

Agora a ideia é calcular a corrente parcial i_s para o lado esquerdo $s = E$ e direito $s = D$, dado pela Eq. (4.63):

$$i_s = \frac{ie}{\hbar} (\Psi_s^{\dagger} t_{sC} \Psi_C - \Psi_C^{\dagger} t_{sC}^{\dagger} \Psi_s). \quad (4.72)$$

Aplicando o resultado das Eqs. (4.71), (4.69) e (4.70), obtemos

$$i_{\lambda} = i_E = -i_D = \frac{e}{\hbar} (\Psi_L^{0\dagger} t_{EC} G_C^A \Gamma_D G_C^R t_{EC} \Psi_E^0), \quad (4.73)$$

em que definimos a função de largura de nível

$$\Gamma_s = i(\Sigma_s^R - \Sigma_s^A). \quad (4.74)$$

Portanto, a corrente total deve ser

$$I = \sum_{\lambda} i_{\lambda} f_E(E_{\lambda}) = \frac{e}{\hbar} \sum_{\lambda} (\Psi_L^{0\dagger} t_{EC} G_C^A \Gamma_D G_C^R t_{EC} \Psi_E^0) f_E(E_{\lambda}). \quad (4.75)$$

Comparando com a equação obtida pelo método de Landauer

$$I = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} T f_E(E) dE, \quad (4.76)$$

iremos conseguir obter a transmissão eletrônica a seguir

$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L(E) G_C^R(E) \Gamma_R(E) G_C^A(E)). \quad (4.77)$$

4.4.3 Densidade de estados

Nesta seção iremos discutir o conceito de densidade de estados e relacioná-la com a função de Green determinada anteriormente, de forma que obteremos uma equação para a densidade de estados geral e local. A densidade de estados está associada ao número de estados permitidos para uma determinada faixa de energia considerada, portanto podemos relacionar a sua definição com a função delta dada por

$$D(\varepsilon) = \sum_{\mu} \delta(\varepsilon - E_{\mu}), \quad (4.78)$$

onde podemos dizer que $D(\varepsilon)d\varepsilon$ nos dá o número de estados entre ε e $\varepsilon - d\varepsilon$.

Se fizermos o traço da função de Green da Eq. (4.18) dependente da energia, poderemos escrever

$$\begin{aligned}
 Tr [G^R(E)] &= \sum_{\mu} \langle E_{\mu} | \frac{1}{E - \varepsilon + i\eta} | E_{\mu} \rangle \\
 &= \sum_{\mu} \frac{1}{E_{\mu} - \varepsilon - i\eta} \\
 &= \sum_{\mu} \frac{E_{\mu} - \varepsilon + i\eta}{(E_{\mu} - \varepsilon) + \eta^2} \\
 &= \sum_{\mu} \left(\frac{E_{\mu} - \varepsilon}{(E_{\mu} - \varepsilon)^2 + \eta^2} + \frac{i\eta}{(E_{\mu} - \varepsilon)^2 + \eta^2} \right). \tag{4.79}
 \end{aligned}$$

Note que a segunda fração é igual a uma delta, uma vez que se considerarmos que $\eta \rightarrow 0$, vamos ter duas opções, a primeira é que a fração é igual a zero se $E_{\mu} \neq \varepsilon$ e a segunda seria infinito se $E_{\mu} = \varepsilon$, ou seja essa expressão se comporta como uma delta do tipo $\delta(\varepsilon - E_{\mu})$. Portanto podemos escrever o traço da função de Green como

$$Tr [G^R(E)] = \sum_{\mu} \frac{1}{E_{\mu} - \varepsilon} + \sum_{\mu} \delta(\varepsilon - E_{\mu}). \tag{4.80}$$

Utilizando a densidade de estado da Eq. (4.78) e aplicando na Eq. (4.79) obtemos

$$Tr [G^R(E)] = \sum_{\mu} \frac{1}{E_{\mu} - \varepsilon} - D(\varepsilon). \tag{4.81}$$

Observe que ainda que o traço da G^R como parte real e imaginária, isso sugere que podemos reescrever a equação de forma que ganhamos a expressão da densidade de estados em função da parte imaginária da função de Green, dada por

$$\begin{aligned}
 D(\varepsilon) &= Re [G^R] - Tr [G^R(E)] \\
 &= Im \{ Tr [G^R] \}. \tag{4.82}
 \end{aligned}$$

Assim podemos ver que sabendo apenas da função de Green retardada, seremos capazes de achar seu traço e a parte imaginária para determinar a densidade de estados.

4.4.4 Função Espectral

Antes de entrarmos no conceito de função espectral, iniciaremos discutindo sobre o tempo de vida dos autoestados da função de onda do dispositivo central em contato com os *Leads*, onde o condutor central isoladamente deve ser escrito por

$$H_C \Psi_{\alpha 0} = \varepsilon_{\alpha 0} \Psi_{\alpha 0}. \tag{4.83}$$

Já sabemos que ao adicionarmos os *Leads*, um termo de autoenergia deve aparecer no Hamiltoniano central, tal que

$$[H_c + \Sigma^R] \psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha. \quad (4.84)$$

Veja que o termo da autoenergia deve ser considerado como sendo não hermitiano, uma vez que no caso de serem hermitianos, a função de comprimento de nível Eq. (4.74) seria anulada. Isso ocorre devido a Σ^R ser igual ao seu adjunto, fazendo as autoenergias retardada e avançada serem iguais. Para que isso seja evitado, consideramos que o termo adicional ao Hamiltoniano central, autoenergia, seja não hermitiano, conseqüentemente a autoenergia ε_α da função de onda deve possuir um termo complexo do tipo

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_\alpha - i\lambda_\alpha/2. \quad (4.85)$$

Como consequência disso, a parte temporal da função de onda terá o termo complexo anulado, onde este termo trará uma exponencial que decai com o tempo. A interpretação disso pode ser compreendida ao imaginarmos que o elétron no interior do condutor vai sumir através de um dos *Leads* após um determinado tempo. Dizemos que isso é o tempo de vida do elétron

$$|\psi_\alpha|^2 = e^{-2\lambda t/\hbar}, \quad (4.86)$$

ou seja, a probabilidade de encontrá-lo vai sendo reduzida com o tempo.

Outro ponto importante é a definição da função espectral A que é definida pela diferença entre as funções de Green retardada e avançada

$$A = i(G^R - G^A) \quad (4.87a)$$

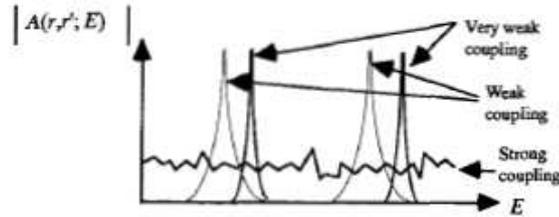
$$= \text{Im} [G^R]. \quad (4.87b)$$

Essa função é importante pelo fato dos picos da função estarem associados aos autovalores da região central isolada e a força de acoplamento da região central com os *Leads* como está sendo representado a Fig. 37.

Se usarmos a função de Green expandida para seus autoestados como já havíamos discutido em seções anteriores

$$G^R = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^*}{E - \varepsilon_{\alpha}}, \quad (4.88)$$

Figura 37 – Representação da função espectral para acoplamentos fracos e fortes, onde os picos das funções correspondem aos autovalores do condutor isolado (Datta, 1997).



Fonte: (Datta, 1997)

aplicando a autoenergia ε_α a essa equação na definição de função, obteremos a função espectral dada por

$$A = i \sum_{\alpha} \left(\frac{\psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^*}{E - \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_{\alpha} - i\lambda_{\alpha}/2} - \frac{\psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^*}{E - \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_{\alpha} + i\lambda_{\alpha}/2} \right) \quad (4.89)$$

$$= \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \frac{\lambda_{\alpha}}{(E - \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_{\alpha})^2 - \lambda_{\alpha}^2/4}.$$

Veja que esta equação nos dá exatamente o comportamento da Fig. 37, uma vez que o termo

$$\delta(E - (\varepsilon_{\alpha 0} + \delta_{\alpha})) = \frac{\lambda_{\alpha}}{(E - \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_{\alpha})^2 - \lambda_{\alpha}^2/4}, \quad (4.90)$$

é exatamente uma delta que resulta nos picos da função espectral exatamente quando $E = \varepsilon_{\alpha 0} + \delta_{\alpha}$ que são as energias de acoplamento.

Existe outra forma de ver a função espectral através ainda das funções de Green retardada e avançada e agora também em termos da função de comprimento de nível. Para isso devemos partir da Eq. (4.87a) e multiplicando por $[G^R]^{-1}$ e $[G^A]^{-1}$, obteremos

$$\begin{aligned} [G^R]^{-1} A [G^A]^{-1} &= i[[G^A]^{-1} - [G^R]^{-1}] \\ &= i[\Sigma^A - \Sigma^R] \\ &= \Gamma. \end{aligned} \quad (4.91)$$

Fazendo a multiplicação de $[G^R]$ e $[G^A]$, encontramos

$$A = G^R \Gamma G^A, \quad (4.92a)$$

ou também

$$A = G^A \Gamma G^R. \quad (4.92b)$$

Um outro ponto importante da função espectral é que ela está diretamente associada a densidade de estados, uma vez que podemos utilizar a Eq. (4.87b) na Eq. (4.82) e obter

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[A(E)], \quad (4.93)$$

onde utilizamos o resultado anterior da função espectral e consideramos um tempo de vida muito longo

$$\begin{aligned}
 D(E) &= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[A(E)] = \frac{1}{2\pi} \int A(\mathbf{r}, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_\alpha}{(E - \varepsilon_{\alpha 0} - \delta_\alpha)^2 - \lambda_\alpha^2/4} \\
 &= \sum_\alpha \delta(E - \varepsilon_{\alpha 0} + \Delta_\alpha).
 \end{aligned} \tag{4.94}$$

Assim, basicamente retornamos para a definição de densidade de estados expressa na Sec. 4.4.3 que nos dá a densidade de estados igual a uma função delta.

4.5 Método recursivo

4.5.1 Equação de Dyson

Nesta seção iremos estudar o método recursivo através da utilização da equação de Dyson. O método recursivo consiste em calcular a função de Green para um sistema de vários componentes acoplados, onde devemos conhecer os subsistemas individuais e a matriz de acoplamento, de forma que iniciamos com um subsistema individual e vamos adicionando os outros posteriormente como ilustrado na Fig. 38. Essa ideia é útil para calcular sistemas mais complexos que seriam muito difíceis de calcular utilizando o método da função de Green inversa da Eq. (4.18), sendo um método convenientemente mais utilizado computacionalmente.

Para entendermos isso, vamos considerar o Hamiltoniano total do sistema

$$H = H_0 + V, \tag{4.95}$$

e a função de Green desse Hamiltoniano e do subsistema

$$(E - H)G = I, \tag{4.96a}$$

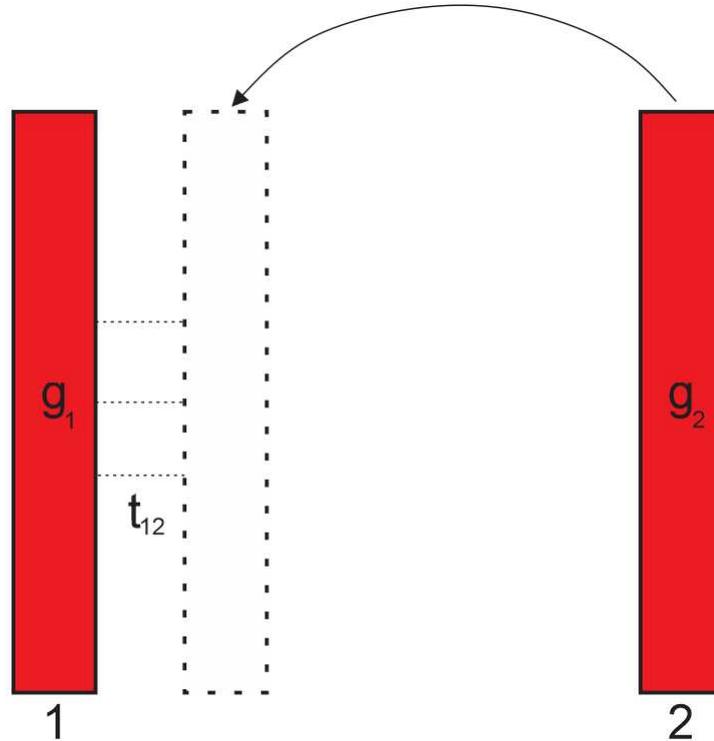
$$(E - H_0)g = I. \tag{4.96b}$$

Substituindo uma equação na outra, podemos obter a relação

$$G = g + gVG. \tag{4.97}$$

Essa equação, conhecida como a equação de Dyson, nos mostra que se adicionarmos um sistema externo qualquer a um sistema que queremos conhecer, basta conhecer o sistema externo e a matriz de acoplamento entre eles.

Figura 38 – Representação de um sistema isolado sendo ligado a um outro sistema que apriori também estava isolado, formando um sistema acoplado pelo parâmetro t_{12} que esta associado a ligação da direita para esquerda.



Fonte: Elaborada pelo autor

No intuito de aplicar esse método de forma prática iremos considerar o sistema da Fig. 38, onde estamos mostrando que o subsistema 1 isolado possui uma função de Green g_1 conhecida, enquanto o subsistema 2 possui uma função de Green g_2 também conhecida, onde ao conectá-los, surge a matriz de acoplamento \mathbf{V} devido a interação entre os *Leads*. Dessa forma, iremos analisar o comportamento da equação de Dyson para dois subsistemas, podendo construir a matriz G do sistema total e g dos subsistemas individuais, tais como

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.98a)$$

$$g = \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix}. \quad (4.98b)$$

Aplicando-as na Eq. (4.97), temos que

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_{12} \\ t_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.99)$$

de forma que

$$G_{11} = g_1 + g_1 V t_{12} G_{21}, \quad (4.100a)$$

$$G_{12} = g_1 t_{12} G_{22}, \quad (4.100b)$$

$$G_{21} = g_2 t_{21} G_{11}, \quad (4.100c)$$

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{21} G_{12}. \quad (4.100d)$$

Substituindo a Eq. (4.100c) na Eq. (4.100a) e organizando os termos para isolar G_A , encontramos

$$[(g_1)^{-1} - \Sigma_{12}] G_{11} = I, \quad (4.101)$$

onde

$$\Sigma_{12} = t_{12} g_2 t_{21}. \quad (4.102)$$

Esta é a autoenergia devido a introdução do sistema B no sistema A. Agora se fizermos a substituição da Eq. (4.100b) na Eq. (4.100d), iremos obter

$$[(g_2)^{-1} - \Sigma_{21}] G_{22} = I, \quad (4.103)$$

onde

$$\Sigma_{21} = t_{21} g_1 t_{12}. \quad (4.104)$$

Dessa forma podemos obter o resultado para todos os termos da matriz de G do sistema total, onde podemos notar o aparecimento de um termo de autoenergia devido a adição de um novo subsistema, então seria esperado que ao adicionarmos um terceiro subsistema, deve surgir um segundo termo de autoenergia.

Para verificar a afirmação anterior, imaginemos que existem outros dois subsistemas individuais na qual um dos subsistemas é o nosso sistema $A + B$ anterior que chamaremos de subsistema C, onde isoladamente definiremos a função de Green como g_C^0 que já sabemos determiná-la pelas Eqs. (4.101), (4.103), (4.100b) e (4.100c), onde sabemos que

$$g_C^0 = [E - H_C - \Sigma^0]^{-1}, \quad (4.105)$$

em que Σ^0 é a soma de todas as autoenergia dos acoplamentos anteriores.

Quanto ao outro sistema, sabemos apenas quem é sua função de Green G_s^0 isolada, onde usando a mesma ideia da Eq. (4.101), obtemos que

$$[(g_C^0)^{-1} - t_{12}g_2t_{21}] G_C = I, \quad (4.106)$$

e ao substituir g_c^0 , iremos obter que

$$[(E - H_C - \Sigma^0 - \Sigma_{Cs}] G_C = I, \quad (4.107)$$

onde

$$\Sigma_C = t_{Cs}g_s t_{sC}, \quad (4.108)$$

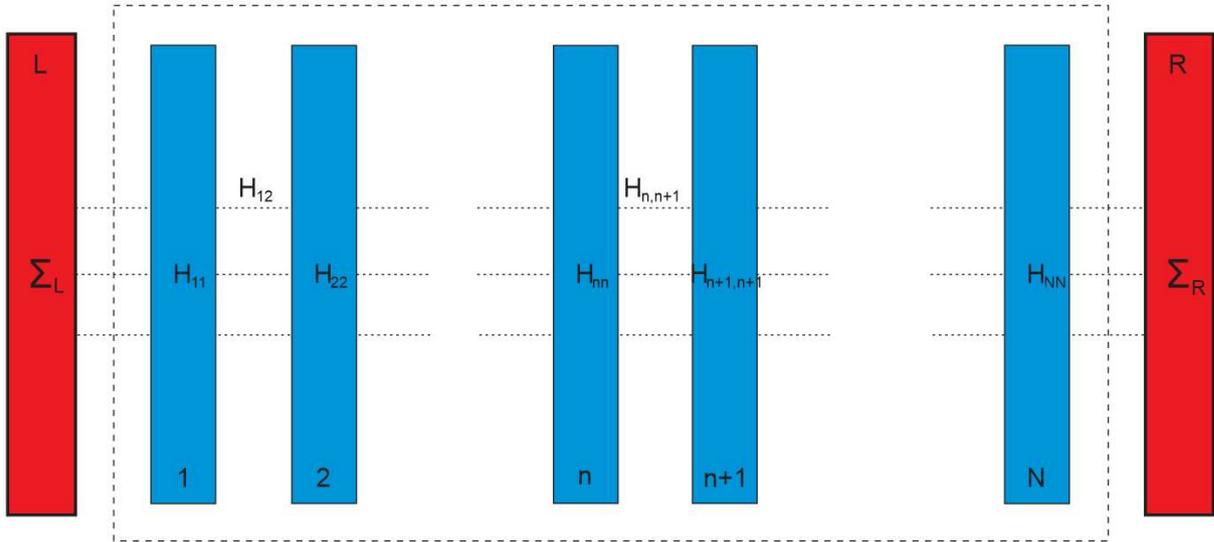
ou seja, para múltiplos eletródos, devemos ter a soma das autoenergias devido a interação como já havíamos previsto anteriormente.

4.5.2 Método Recursivo Para Sistemas Unidimensionais

Em geral o método recursivo se torna mais útil em sistemas muito mais complexos, onde apresenta um número muito amplo de variáveis e subsistemas dentro do problema, tornando o método de inversão da função de Green na Eq. (4.53) muito difícil de trabalhar. Por outro lado, o método recursivo se torna mais chamativo para facilitar a sua aplicação em programas de computadores. Neste momento utilizaremos o método em uma situação em que consideraremos uma quantidade N de subsistemas.

Na Fig. 39 estamos considerando exatamente esse número de subsistemas, na qual dividimos o sistema total em três partes; em uma parte está o *Lead* esquerdo, a outra na região central com os n subsistemas e na terceira está o *Lead* direito. Ainda devemos notar que o termo de acoplamento entre dois subsistemas da região central i e $i + 1$ é dado por $H_{i,i+1}$, de forma que o Hamiltoniano do centro e a função de Green fica

Figura 39 – Representação de múltiplos subsistemas acoplados aos eletrodos esquerdos e direitos de autoenergia Σ_L e Σ_R , onde o subsistema H_{11} até H_{NN} podem ser vistos como único sistema que compõe um Hamiltoniano tridiagonal com os elementos H_{ij} . Os termos H_{ij} para $i = j$ são as energias internas de cada subsistema e para $i \neq j$ são os termos de acoplamento.



Fonte: Elaborada pelo autor

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & 0 & 0 \\ H_{21} & H_{21} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & H_{n(N-1)} & H_{n(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & H_{N,N-1} & H_{NN} \end{pmatrix}, \quad (4.109a)$$

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1(N-1)} & G_{1N} \\ G_{21} & G_{21} & \dots & G_{2(N-1)} & G_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \dots \\ G_{n1} & G_{n1} & \dots & G_{n(N-1)} & G_{n(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \dots \\ G_{N1} & G_{N2} & \dots & \dots & G_{NN} \end{pmatrix}. \quad (4.109b)$$

De forma geral estamos vendo a região central como um único *Lead*, onde acoplaremos individualmente os *Lead* da esquerda e da direita, esse acoplamento faz surgir as únicas duas autoenergias do sistema $\Sigma_L = \Sigma_{11}$ e $\Sigma_R = \Sigma_{NN}$, cuja função de Green é dada por

$$[E - H - \Sigma]G = I. \quad (4.110)$$

Levaremos em consideração que a função de largura de nível da Eq. (4.74) do eletrodo da esquerda e da direita é uma matriz com todos os elementos zerados com exceção de $\Gamma_{L11} = -2Im[\Sigma_L]$ e $\Gamma_{RNN} = -2Im[\Sigma_R]$. Isso sugere que a Eq. (4.77) da transmissão eletrônica e densidade de corrente não necessita de todos os termos da matriz da função de Green

$$T = Tr(\Gamma_L G_{1N} \Gamma_R G_{1N}^\dagger), \quad (4.111a)$$

$$\rho(E) = -\frac{i}{\pi} \sum_{i=1}^N Im(Tr(G_{ii})), \quad (4.111b)$$

sendo útil para o método recursivo, uma vez que só precisamos dos elementos G_{1N} e G_{ii} .

Para chegarmos nesse resultado, primeiramente devemos analisar o problema considerando que estamos adicionando cada subsistema individualmente junto ao eletrodo do lado esquerdo até o i -ésimo subsistema. Ou seja, consideramos que a Fig. 39 chega apenas até o i -ésimo ponto, então se utilizarmos a Eq. (4.97) veremos que

$$G_{i,i} = G_{i,i}^i + G_{i,i}^i t_{i,i-1} G_{i-1,i}. \quad (4.112)$$

Também conseguimos fazer

$$G_{i-1,i} = G_{i-1,i-1}^{i-1} t_{t-1,t} G_{i,i}, \quad (4.113)$$

substituindo na Eq. (4.112) e reorganizando

$$G_{ii} = \left[(G_{i,i}^i)^2 - t_{i,i-1} G_{i-1,i-1}^{i-1} t_{t-1,t} \right]^{-1}. \quad (4.114)$$

Devemos observar que estamos considerando que os subsistemas estão interagindo apenas com os primeiros vizinhos, caso contrário, uma nova equação de auto energia de interação deveria ser adicionada a esta equação. Caso façamos o mesmo procedimento anterior partindo do eletrodo direito para o i -ésimo subsistema, a Eq. (4.112) se torna

$$G_{i,i} = G_{i,i}^i + G_{ii}^i t_{i,i+1} G_{i+1,i}, \quad (4.115)$$

onde

$$G_{i+1,i} = G_{i+1,i+1}^{i+1} t_{t+1,t} G_{i,i}, \quad (4.116)$$

de forma que

$$G_{ii} = \left[(G_{i,i}^i)^2 - t_{i,i+1} G_{i+1,i+1}^{i+1} t_{t+1,t} \right]^{-1}. \quad (4.117)$$

É interessante observar que na Eq. (4.112) ganhamos uma autoenergia devido a interação do subsistema $i-1, i-1$ com o i, i e agora obtivemos uma autoenergia devido a interação de i, i com $i+1, i+1$. Isso sugere que para um sistema completo da Fig. 39, a função de Green de todo o sistema deve ser

$$G_{ii} = \left[(G_{i,i}^i)^2 - t_{i,i-1} G_{i-1,i-1}^{i-1} t_{t-1,t} - t_{i,i+1} G_{i+1,i+1}^{i+1} t_{t+1,t} \right]^{-1}, \quad (4.118)$$

ou seja, devemos considerar a auto energia de interação devido aos subsistemas nos dois lados do subsistema i, i .

Agora, se simplesmente utilizarmos a equação de Dyson, iremos obter

$$G_{1,N} = G_{1,i-1} H_{i-1,i} G_{ii}^i, \quad (4.119)$$

com este resultado podemos calcular a transmissão através do sistema total usando o método recursivo.

4.6 Calculando a transmissão para um e dois níveis

Nesta seção iremos discutir o comportamento da densidade de estados para um sistema com um e dois níveis de energia, obtendo tanto a expressão para a transmissão eletrônica, quanto a expressão para a função espectral e utilizar a definição de densidade de estados para obter uma gráfico mostrando os picos de densidade de estados no entorno dos pontos de autoenergia.

4.6.1 Modelo de um nível

No caso para um único nível, primeiramente devemos observar que consideraremos apenas o problema em que Σ seja um número real, portanto devemos observar que a Eq. (4.74) pode ser escrita por

$$\Gamma = -2\text{Im}[\Sigma^R], \quad (4.120)$$

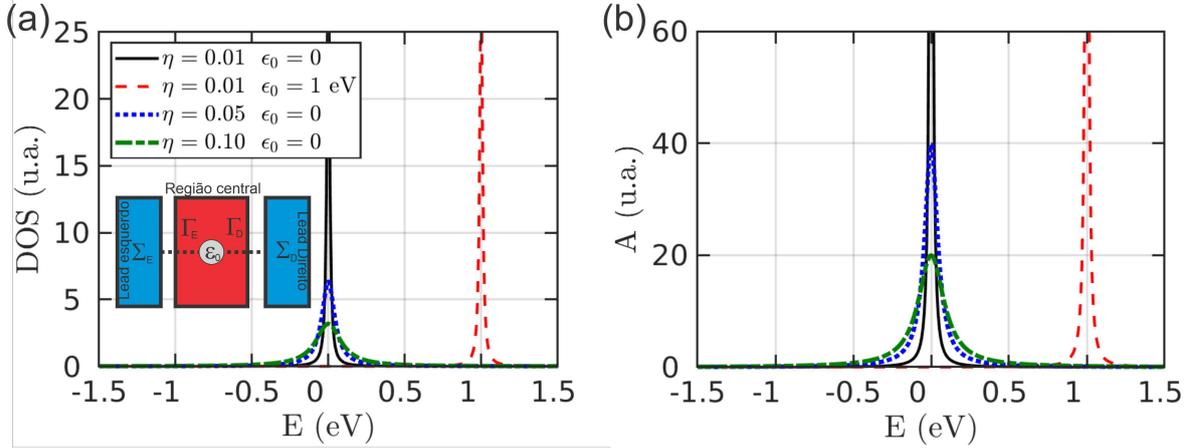
e também

$$\Gamma^R = \text{Re}[\Sigma^R] - \frac{i}{2}\Gamma, \quad (4.121)$$

sabendo da Eq. (4.51) que

$$\Sigma^R = \Sigma_E^R + \Sigma_D^R, \quad (4.122)$$

Figura 40 – (a) Densidade de estado e (b) função espectral para o sistema de um sítio isolado, isto é, no caso em que a função de Green retardada (G^R) é a própria função de Green não-vestida g^r (ou equivalentemente, não-perturbada) dada pela Eq. (4.124) (ou similarmente à Eq. (4.144)). Diferentes valores de *broadening* η e energia local ϵ_0 . Tais gráficos podem ser obtidos plotando as Eqs. (4.111b) e (4.125), respectivamente para os painéis (a) e (b)



Fonte: Elaborada pelo autor

portanto devemos ter

$$\Sigma_{E(D)}^R = -i \frac{\Gamma_{L(D)}}{2}, \quad (4.123)$$

tornando possível escrever a função de Green da região central da seguinte forma

$$G^R(E) = [E - \epsilon_0 - i \frac{[\Gamma_E - \Gamma_D]}{2}]^{-1}. \quad (4.124)$$

Aplicando este resultado na função espectral (4.87b), temos

$$A(E) = -2\text{Im}[G^R] = -2\text{Im}[(E - \epsilon_0 - i \frac{[\Gamma_E - \Gamma_D]}{2})^{-1}] = \frac{\Sigma_L + \Sigma_R}{(E - \epsilon_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (4.125)$$

Usando o resultado da Eq. (4.125), podemos encontrar a transmissão utilizando que $G^R = [G^A]^* = [G^A]^\dagger$, daí

$$T(E) = \Gamma_L(E) G_C^R(E) \Gamma_R(E) G_C^A(E) = \frac{\Sigma_L \Sigma_R}{(E - \epsilon_0)^2 + \frac{(\Gamma_E - \Gamma_D)^2}{4}}, \quad (4.126)$$

e a condutância para temperatura igual a zero fica

$$\begin{aligned} G &= \frac{e^2}{\hbar} T(E_F) \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(E - \epsilon_0)^2 + \frac{(\Gamma_E - \Gamma_D)^2}{4}}. \end{aligned} \quad (4.127)$$

Nas Figs. 40(a) e 40(b) apresentamos a densidade de estados e a função espectral, respectivamente, para o caso de um sistema com apenas um sítio isolado, como ilustrado

no *inset* da figura. Note pela Eq. (4.124) que a função de Green para o sistema de um sítio isolado é justamente a função de Green não-vestida (Eq. (4.144)). Nos gráficos utilizou-se que $\eta = (\Gamma_E - \Gamma_D)/2$ obtido apenas por comparação com a expressão da Eq. (4.96b), quando consideramos o caso da função de Green retardada ou avançada na Sec. 4.5.1. Ambos os gráficos e as expressões analíticas, Eqs. (4.111b) e (4.125), respectivamente para a densidade de estados e função espectral, nos permitem perceber o formato Lorentizano das curvas com o pico para o valor da energia de ressonância, isto é, no polo da função em $E = \varepsilon_0$. Modificando ε_0 nota-se um deslocamento do pico para a posição em que $E = \varepsilon_0$, como representado pelas curvas tracejadas vermelhas para $\varepsilon_0 = 1$ eV. O papel do *broadening* é suavizar o pico, deixando-o mais largo, como pode ser notado ao comparar as curvas em preto, azul e verde para $\eta = 0.01$, $\eta = 0.05$, e $\eta = 0.10$, respectivamente.

4.6.2 Modelo de dois níveis

Agora podemos fazer o mesmo da seção anterior para avaliar o caso de dois níveis, onde teremos um Hamiltoniano 2×2 semelhante ao caso anterior, mas antes não poderíamos ter uma matriz, pois só teríamos um sítio e uma matriz 1×1 .

Como falamos anteriormente, a matriz do Hamiltoniano é dada por

$$H_C = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & -t \\ -t & \varepsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (4.128)$$

Note pela Fig. 41 que o esquema para dois sítios consiste basicamente em acoplar os sítios entre si e entre os *Leads*, portanto devemos ter quatro funções de largura de nível devido aos quatro acoplamentos, dados por

$$\Sigma_E = \begin{pmatrix} -i\frac{\Gamma_{E1}}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\Gamma_{E2}}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.129a)$$

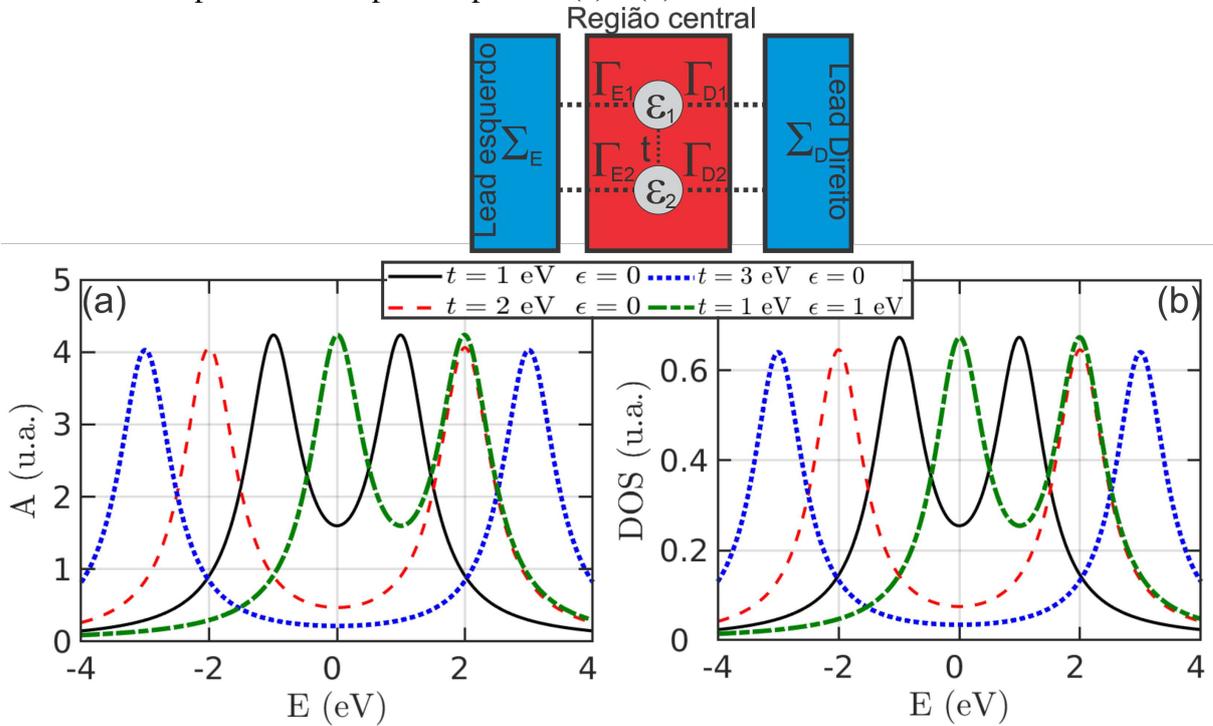
e

$$\Sigma_D = \begin{pmatrix} -i\frac{\Gamma_{D1}}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\Gamma_{D2}}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.129b)$$

Assim, temos todas as variáveis que determinam a função de Green central da Eq. (4.53), dada por

$$\begin{aligned} G_C &= [E - H_C - \Sigma]^{-1} \\ &= \frac{1}{(E + i\Gamma_1 - \varepsilon_1)(E + i\Gamma_2 - \varepsilon_2) - t^2} \begin{pmatrix} (E + i\Gamma_2 - \varepsilon_2) & t \\ t & (E + i\Gamma_1 - \varepsilon_1) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.130)$$

Figura 41 – (a) Função espectral e (b) densidade de estados para o sistema de um sítio isolado, isto é, no caso em que a função de Green retardada (G^R) é a própria função de Green não-vestida g^r (ou equivalentemente, não-perturbada) dada pela Eq. (4.124) (ou similarmente à Eq. (4.144)). Diferentes valores de *broadening* η e energia local ϵ_0 são assumidos. Tais gráficos podem ser obtidos plotando as Eqs. (4.111b) e (4.125), respectivamente para os painéis (a) e (b).



Fonte: Elaborada pelo autor

É interessante observar que essa expressão para a função de Green é bastante geral para o caso de dois níveis. Poderíamos gerar um caso específico, como por exemplo, reduzindo o esquema mostrado na Fig. 41 ao desconsiderarmos algumas interações, tais como $\Gamma_{E2} = 0$ e $\Gamma_{D1} = 0$. Esse exemplo, nos leva a obter um sistema de cadeia linear de dois níveis e escrever a autoenergia como

$$\Sigma_E = \begin{pmatrix} -i\frac{\Gamma_{E1}}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad \Sigma_D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -i\frac{\Gamma_{D2}}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.131)$$

Outra situação seria fazer um acoplamento paralelo ao considerarmos $\Gamma_{E1} = \Gamma_{E2}$ e $\Gamma_{D1} = \Gamma_{D2}$, onde o acoplamento entre os sítios e os *Leads* são equivalentes, juntamente com o fluxo de corrente que passa pelos *Leads* para diferentes valores de t . Nesse caso somos capazes de utilizar a função espectral e densidade de estados respectivamente das Eqs. (4.87b) e (4.111b) como representado no Figs. 41(a) e 41(b). Note que para o valor de $t = 0$, temos apenas a superposição das densidades de estados e função espectral e quando consideramos $t = 2$ e $t = 3$ tem um deslocamento na posição dos picos de nível, representando as autoenergias do sistema.

Observe que até o momento consideramos apenas os casos em que as funções de transmissão ressonante têm a sua forma igual a função Lorentziana, onde os seus máximos correspondentes às autoenergias do sistema central e a largura associada ao acoplamento com os eletrodos dada pelas funções de largura de nível. Poderíamos considerar um caso diferente ao afirmarmos que os efeitos ressonantes sejam mais consideráveis. Como seria no caso de um acoplamento em T , onde as funções $\Gamma_{E2} = \Gamma_{D2} = 0$ e um acoplamento simétrico dado por $\Gamma_{E1} = \Gamma_{D1}$.

Ainda podemos ver que a função espectral nos permite observar que o pico do gráfico no segundo nível de energia é mais fino que o pico no primeiro nível, uma vez que o segundo nível não está diretamente acoplado aos eletrodos e esse aumento na largura só é possível indiretamente através do primeiro nível. Como vimos anteriormente, a largura dos níveis está associado a função de largura de nível que aqui foi considerada zero para os *Leads* e só surge com o acoplamento entre os níveis. Agora, em relação a função de transmissão ainda com acoplamento em T , podemos verificar que ao considerarmos $t = 0$ a transmissão é diferente de zero apenas no primeiro nível, uma vez que o segundo nível está completamente desacoplado dos *Leads* e do primeiro nível, ou seja, o segundo nível estaria isolado do sistema. Note ainda que para t finitos encontramos que a transmissão ocorre na energia do primeiro nível e bastante próxima das energias do segundo, mas neste caso não tem a forma lorentziana, sendo zero exatamente na energia do segundo nível. Devemos ressaltar que isso ocorre devido aos efeitos de ressonância destrutiva, uma vez que fluxo de corrente passa do eletrodo esquerdo para o direito passando primeiramente pelo nível 1 e parte indo para o *lead* direito e a outra parte indo para o nível dois e retornando para o primeiro nível gerando efeitos destrutivos devido a amplitudes de transmissões negativas, de forma que as correntes nos níveis um e dois se sobrepõem com fases opostas, gerando feitos destrutivos.

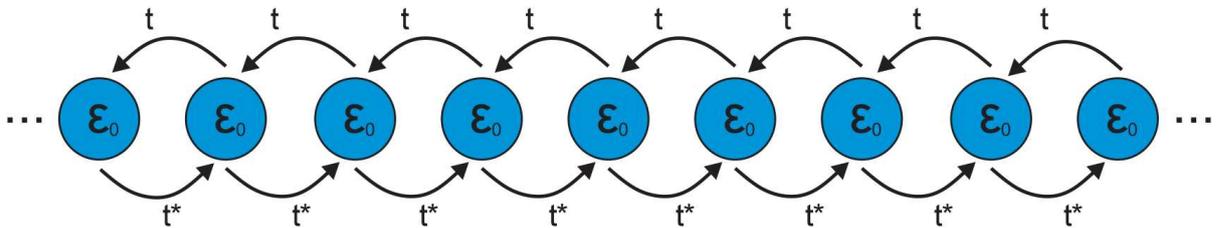
4.7 Sistema de cadeia linear não-interagente

Nesta seção iremos utilizar o método da função de Green no equilíbrio para resolver o problema de cadeia linear unidimensional, utilizando um meio mais intuitivo. A cadeia linear consiste em n partículas distribuídas de forma que ficam uma ao lado da outra com seus parâmetros de *hopping* t devido ao acoplamento entre elas, como podemos observar ao olharmos a Fig. 42. Inicialmente determinaremos o Hamiltoniano para uma cadeia linear unidimensional e obter a equação de movimento correspondente, em seguida aplicaremos essa equação para uma

cadeia linear de dois átomos, posteriormente para uma cadeia semi-infinita e infinita. De forma que iremos determinar as propriedades de transporte para cada caso, tais como a densidade de estados e a transmissão eletrônica.

4.7.1 Hamiltoniano da cadeia linear

Figura 42 – Sistema de cadeia linear infinito, para o caso particular em que todos os sítios são idênticos, onde t representa o *hopping* devido aos primeiros vizinhos mais próximos da esquerda para direita e t^* da direita para esquerda, na qual ϵ_0 é a energia de um sítio individual.



Fonte: Elaborada pelo autor

Agora, iremos considerar que a cadeia linear é descrita pelo Hamiltoniano não-interativo contendo os i -sítios e um termo cinético que conecta todos os primeiros vizinhos mais próximos por meio de um parâmetro de *hopping* t , tal como

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_i \left(t_{i+1,i} c_i^\dagger c_{i+1} + t_{i,i+1} c_{i+1}^\dagger c_i \right) \\ &= H_{pot} + H_{cin}. \end{aligned} \quad (4.132)$$

O primeiro termo corresponde a energia interna dos sítios e o segundo termo corresponde à energia cinética, descrevendo a destruição de uma partícula no sítio $i + 1$ e a criação de outra partícula no local i com amplitude de probabilidade $t_{i+1,i}$. O terceiro termo descreve o processo reverso (Odashima *et al.*, 2017).

Assim, podemos determinar os comutadores

$$[c_j, H_{pot}] = \sum_i \epsilon_i [c_j, c_i^\dagger c_i] = \sum_i \epsilon_i \delta_{ij} c_i = \epsilon_j c_j, \quad (4.133a)$$

$$\begin{aligned} [c_j, H_{cin}] &= \sum_i \left(t_{i+1,i} [c_j, c_i^\dagger c_{i+1}] + t_{i,i+1} [c_j, c_{j+1}^\dagger c_i] \right) \\ &= \sum_i \left(t_{i+1,i} \delta_{ij} c_{i+1} + t_{i,i+1} \delta_{i,j+1} c_i \right) \\ &= t_{j+1,j} c_{j+1} + t_{j-1,j} c_{j-1} \\ &= \sum_{k=\pm 1} t_{j+k,j} c_{j+k}. \end{aligned} \quad (4.133b)$$

Se utilizarmos a equação de movimento podemos determinar a seguinte relação

$$EG_{ij}^r = \delta_{ij} + \left\langle \left\langle [c_i, H]; c_j^\dagger \right\rangle \right\rangle, \quad (4.134)$$

ou ainda

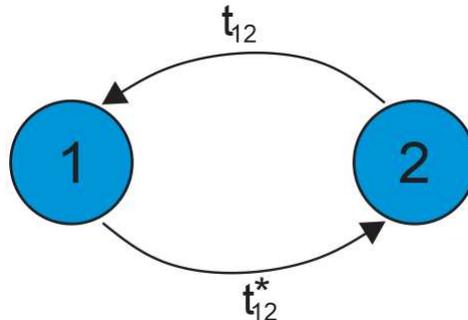
$$(E - \varepsilon_i + i\eta) G_{ij}^r = \delta_{ij} + \sum_{k=\pm 1} t_{i+k,i} G_{i+k,j}^r. \quad (4.135)$$

Essa equação nos dá os operadores de G_{ij}^r considerando os termos de acoplamento entre os sítios no sistema. É importante ressaltar que esta técnica não é voltada para um sistema de muitos corpos. Em geral, para um caso cujo Hamiltoniano tem operadores de duas partículas, ou seja, um produto de quatro operadores, ele irá gerar funções de Green de múltiplas partículas (Bruus e Flensberg, 2004), (Haug *et al.*, 2008), (Odashima *et al.*, 2017). Ainda devo ressaltar que o sistema de cadeia linear é a princípio infinito, mas para fins práticos está sendo truncado em um determinado nível.

4.7.2 Cadeia linear de dois sítios

Primeiramente iremos considerar o caso para uma cadeia linear de dois sítios, onde obteremos o seu Hamiltoniano e determinaremos a função de Green do sistema para então obter a densidade de estados e sua transmissão eletrônica. Em geral podemos ver essa cadeia como sendo dois núcleos de átomos se ligando, como por exemplo no caso de um átomo de hidrogênio, que a aproximação entre esses dois átomos permite a hibridização dos seus orbitais com o parâmetro de *hopping* t que os acoplam, ver Fig. 43.

Figura 43 – Representação para um sistema com dois sítios 1 e 2 distintos, onde os parâmetros de acoplamento podem ser vistos como t_{12} da esquerda para direita e $t_{21} = t_{12}^*$ da direita para esquerda.



Fonte: Elaborada pelo autor

O Hamiltoniano para um sistema de dois níveis deve ser obtido pela Eq. (4.132) com

$n = 2$, onde podemos escrevê-lo como

$$H = \varepsilon_0 c_1^\dagger c_1 + \varepsilon_0 c_2^\dagger c_2 + t c_2^\dagger c_1 + t c_1^\dagger c_2, \quad (4.136)$$

onde definimos a energia interna de cada sítio por ε_0 e os parâmetros de *hopping* t . Podemos escrever este Hamiltoniano na forma matricial como

$$H = h_0 + V = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t_{12}^* \\ t_{12} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & t_{12}^* \\ t_{12} & \varepsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (4.137)$$

na qual h_0 é o Hamiltoniano para os sítios isolados e V os parâmetros que acoplam esses sítios como sendo a perturbação no sistema. Assim, podemos determinar facilmente a energia interna dos sítios ao diagonalizar essa matriz, sendo dada por

$$\det \begin{pmatrix} E - \varepsilon_1 & t_{12}^* \\ t_{12} & E - \varepsilon_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.138)$$

em que

$$(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2) - |t_{12}|^2 = 0, \quad (4.139)$$

onde

$$E^\pm = \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \pm \sqrt{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2 - 4(\varepsilon_1 \varepsilon_2 - |t|^2)}}{2}. \quad (4.140)$$

Note que no caso onde os átomos são idênticos com g_1^r, g_2^r e $|t_{12}|^2 = |t|^2$, iremos obter a autoenergia $E = \varepsilon_0 \pm |t|$, obtida na referência (Odashima *et al.*, 2017).

Agora a ideia é obtermos os elementos da função de Green G para o sistema de dois átomos, que escrita na forma matricial pode ser dada por

$$\mathbf{G}^r(E) = \begin{pmatrix} G_{11}^r(E) & G_{12}^r(E) \\ G_{21}^r(E) & G_{22}^r(E) \end{pmatrix}. \quad (4.141)$$

Para isso, utilizaremos a Eq. (4.135) e obteremos

$$(E - \varepsilon_1 + i\eta) G_{11}^r(E) = 1 + t G_{21}^r(E), \quad (4.142a)$$

$$(E - \varepsilon_1 + i\eta) G_{21}^r(E) = t^* G_{11}^r(E). \quad (4.142b)$$

Assim podemos ver que ao desacoplarmos os átomos 1 e 2 iremos basicamente dizer que $t = 0$, conseqüentemente a função de Green isolada deve ser

$$G_{11}^r(E)|_{t=0} = g_1^r(E) = (E - \varepsilon_1 + i\eta)^{-1}. \quad (4.143)$$

Essa equação se refere a função de Green tanto para o átomo 1 isolado quanto para o átomo 2, um vez que podemos construir a Eq. (4.142a) para o sítio 2, obtendo a G_{22} e usar o mesmo argumento para obter

$$g_2^R(E) = (E - \varepsilon_2 + i\eta)^{-1}. \quad (4.144)$$

Podemos fazer uso das equações para os sítios isolados para escrevê-las como função da equação do sistema acoplado ao substituir nas Eqs. (4.142a) e (4.142b)

$$G_{11}^r(E) = g_1^r(E) + g_1^r(E)t_{12}G_{21}^r(E), \quad (4.145a)$$

$$G_{21}^r(E) = g_2^r(E)t_{12}^*G_{11}^r(E). \quad (4.145b)$$

Essas equações podem ser vistas com a equação de Dyson para um acoplamento de dois sistemas que corresponde escrever

$$\begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r \\ G_{21}^r & G_{22}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1^r & 0 \\ 0 & g_2^r \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1^r & 0 \\ 0 & g_2^r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_{12} \\ t_{12}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r \\ G_{21}^r & G_{22}^r \end{pmatrix}, \quad (4.146)$$

em que

$$\mathbf{G} = \mathbf{g}_0 + \mathbf{g}_0 \mathbf{V} \mathbf{G}, \quad (4.147)$$

onde

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r \\ G_{21}^r & G_{22}^r \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} g_1^r & 0 \\ 0 & g_2^r \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} 0 & t_{12} \\ t_{12}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.148)$$

sendo \mathbf{g}_0 a matriz da função de Green para o sistema isolado e \mathbf{V} a matriz de acoplamento que leva os termos de *hopping* t , análogas aos termos da Eq. (4.97).

Agora podemos obter as funções de Green G_{11}^r em função da equação isolada apenas substituindo a Eq. (4.145b) na Eq. (4.145a), tal como

$$G_{11}^r(E) = g_1^r(E) + g_1^r(E)t_{12}(g_2^r(E)t_{12}^*G_{11}^r(E)). \quad (4.149)$$

Isolando G_{11}^r , obtemos

$$\begin{aligned}
G_{11}^r(E) &= \frac{g_1^r(E)}{1 - g_1^r(E)t_{12}g_2^r(E)t_{12}^*} \\
&= \frac{(E - \varepsilon_1 + i\eta)^{-1}}{1 - |t_{12}|^2 (E - \varepsilon_1 + i\eta)^{-1} (E - \varepsilon_2 + i\eta)^{-1}} \\
&= \frac{1}{E - \varepsilon_1 + i\eta - |t_{12}|^2 (E - \varepsilon_2 + i\eta)^{-1}} \\
&= \frac{E - \varepsilon_2 + i\eta}{(E - \varepsilon_1 + i\eta)(E - \varepsilon_2 + i\eta) - |t_{12}|^2} \\
&= \frac{E - \varepsilon_2 + i\eta}{(E - E^+)(E - E^-)} \\
&= \frac{A}{(E - E^+)} + \frac{B}{(E - E^-)}. \tag{4.150}
\end{aligned}$$

Resolvendo o problema usando frações parciais, iremos obter o seguinte resultado

$$G_{11}^r = \frac{(E^+ - \varepsilon_2)/(E^+ - E^-)}{E - E^+} + \frac{(\varepsilon_2 - E^-)/(E^+ - E^-)}{E - E^-}. \tag{4.151}$$

Considerando o caso particular para $t = t_{12} = t_{12}^*$, $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 = \varepsilon_2$, ou seja, considerando átomos idênticos, iremos obter

$$G_{11}^r = \frac{1/2}{E - (\varepsilon_0 - |t|) + i\eta} + \frac{1/2}{E - (\varepsilon_0 + |t|) + i\eta}, \tag{4.152}$$

e por simetria do sistema temos que $G_{11}^r(E) = G_{22}^r(E)$. Essa equação nos permite ver com bastante facilidade o caráter discreto do sistema de dois sítios com dois pólos nas energias do orbital ligante e antiligante $E = \varepsilon_0 \pm |t|$, onde podemos ver isso ao utilizarmos a densidade de estados.

Também podemos escrever que $G_{12}^r(E) = G_{21}^r(E)$ podendo ser determinado fazendo a substituição da Eq. (4.152) na Eq. (4.145b), onde obtemos

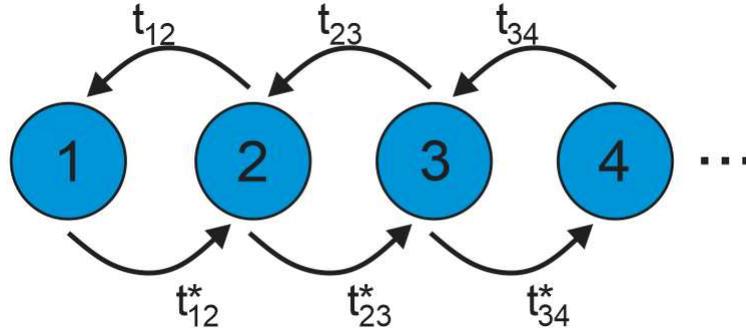
$$G_{21}^r(E) = \frac{1}{2} \left(\frac{(E - \varepsilon_0 + i\eta)^{-1}}{E - (\varepsilon_0 - |t|) + i\eta} + \frac{(E - \varepsilon_0 + i\eta)^{-1}}{E - (\varepsilon_0 + |t|) + i\eta} \right), \tag{4.153}$$

permitindo calcular todos os elementos da função de Green matricial e podendo ser utilizada para calcular algumas propriedades, tais como o transporte eletrônico ou a função espectral.

4.7.3 Cadeia linear semi-infinita e infinita

Agora iremos apresentar o caso para uma cadeia linear semi-infinita, que consiste em termos n átomos para uma direção, partindo de um ponto finito para um ponto infinito como está sendo representado na Fig. 44.

Figura 44 – Representação para um sistema com sítios semi-inifito, onde os parametros de acoplamento podem ser vistos como t_{ij} , sendo o acoplamento do sítio i com o sítio j (acoplamento da esquerda com a direita). Por simetria do sistema, podemos dizer que $t_{ij} = t_{ji}$, em que é visto como o acoplamento inverso (da direita para esquerda).



Fonte: Elaborada pelo autor

Basicamente iremos imaginar que o sistema semi-infinito será encapsulado e representado como um único sítio com uma função de Green efetiva e acoplá-lo a um outro sítio para termos um sistema equivalente ao mostrado na Sec. 4.7.2 para dois átomos. Em geral é o mesmo que dizer que o sítio dois da Fig. 43 é dividido em n átomos e imaginar essa divisão como apenas um átomo com uma descrição efetiva, portanto os dois sítios não são mais idênticos, ver Fig. 44. Então podemos utilizar a Eq. (4.135) de movimento novamente e determinar as equações

$$G_{11}(E) = g_1(E) + g_1(E)t_{12}G_{21}(E), \quad (4.154a)$$

$$G_{21}(E) = g_2(E)t_{12}^*G_{11}(E), \quad (4.154b)$$

sendo g_1 e g_2 as funções de Green para os sistemas isolados.

É importante notar que o sítio dois é em si próprio um sistema de cadeia linear semi-infinita quando consideramos infinitos sítios dentro do sítio 2 efetivo, conseqüentemente a função de Green efetiva é $g_2 = G_{11}^r$. Então, se substituirmos a Eq. (4.154b) na Eq. (4.154a) iremos obter a seguinte equação

$$g_1(E)|t|^2G_{11}^2(E) - G_{11}(E) + g_1(E) = 0, \quad (4.155)$$

sendo uma equação de segundo grau cuja resposta é dada por

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{1}{2|t|^2g_1} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4|t|^2g_1^2} \right) \\ &= \frac{E - \varepsilon_0 + i\eta}{2|t|^2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4|t|^2}{(E - \varepsilon_0 + i\eta)^2}} \right). \end{aligned} \quad (4.156)$$

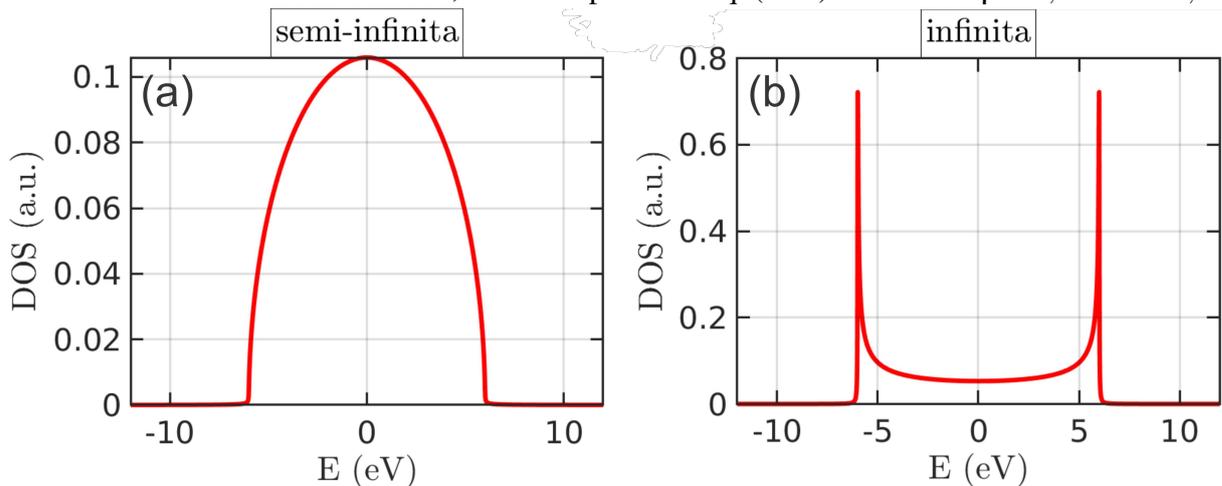
Para que a solução da função de Green não divirja quando E tende ao infinito, devemos escolher

$$G_{11} = \frac{E - \varepsilon_0 + i\eta}{2|t|^2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4|t|^2}{(E - \varepsilon_0 + i\eta)2}} \right). \quad (4.157)$$

Fatorando -1 para fora da raiz obtemos a contribuição imaginária que é não-nula somente na região $|E - \varepsilon_0| < 2|t|$, isto é, dentro da largura da banda. Isso nos dá a densidade de estados na borda, ou na “superfície” do sítio:

$$\begin{aligned} \rho_1(E) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{11}(E)] \\ &= \frac{\theta(2|t| - |E - \varepsilon_0|)}{\pi|t|} \sqrt{1 - \left(\frac{E - \varepsilon_0}{2|t|}\right)^2}. \end{aligned} \quad (4.158)$$

Figura 45 – Densidade de estados para uma cadeia linear (a) semi-infinita e (b) infinita para infinitos sítios vestidos, obtidos a partir da Eq. (4.82) utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1,0$.



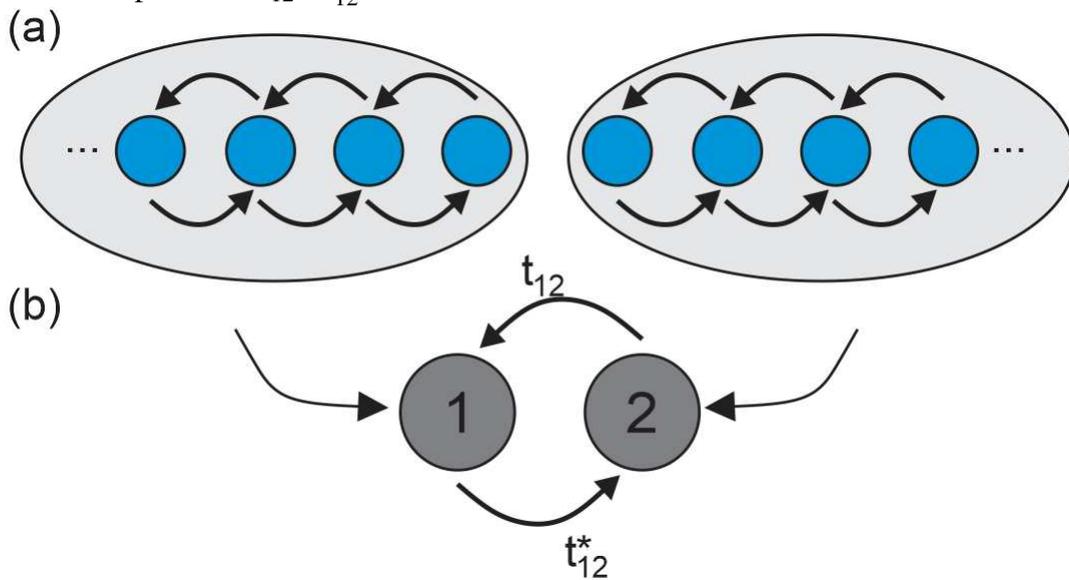
Fonte: Elaborada pelo autor

Em geral podemos notar que a densidade de estados na Fig. 45(a) possui regiões de estados não ocupados com a Eq. (4.158) quando $|E - \varepsilon_0| < 2|t|$, criando um limite na densidade de estados do sistema, mesmo sendo um problema semi-infinito. Isso está intimamente relacionado com a parte real da função de Green G_{11} da Eq. (4.157), uma vez que as partes imaginária e reais estão associadas por uma transformação de Hilbert (??, ??), (Haydock, 1980). Analisando a parte real da função de Green podemos ver que G_{11} decai com $1/E$ no limite assintótico, garantindo uma densidade de estados limitados.

Note que podemos utilizar a mesma ideia do sistema semi-infinito para obter um sistema de cadeia linear completamente infinita para a esquerda e para a direita, onde podemos

ver isso ao acoplarmos duas cadeias lineares semi-infinitas, como está sendo mostrado na Fig. 46. Então basicamente podemos dizer que estamos considerando o acoplamento de dois sítios, onde as funções de Green correspondem a uma equação efetiva para um sistema semi-infinito. Então

Figura 46 – (a) Representação para um sistema com dois sítios semi-infinita, formando uma cadeia infinita, onde estão sendo envelopadas ambas as cadeias. (b) Os sítios semi-infinitos da esquerda são vistos como o sítio efetivo $\bar{1}$ e os sítios semi-infinitos da direita são vistos como o sítio efetivo $\bar{2}$, juntamente com os parâmetros de acoplamento t_{12} e t_{12}^* .



Fonte: Elaborada pelo autor

se considerarmos dois sítios efetivos acoplados, basicamente podemos utilizar o resultado obtido na Sec. 4.7.2, na qual teremos uma Eq. (4.150), onde consideramos as funções de Green isoladas

$$g_1^r = g_2^r = \bar{G}_1$$

$$G_{11} = \frac{\bar{G}_1}{1 - \bar{G}_1^2 |t|^2}, \quad (4.159)$$

sendo \bar{G}_1 a função de Green para o sítio semi-infinito efetivo isolado.

Observe ainda que podemos obter esse mesmo resultado basicamente considerando que entre os dois encapsulamentos da Fig. 46 têm uma um sítio acoplado, então podemos ver o sistema como três sítios, uma para o sítio efetivo do encapsulamento do sistema semi-infinito esquerdo ou para o direito com função de Green isolado \bar{G}_1 e no centro o novo sítio com função de Green isolado dado por g_0 . Já vimos anteriormente que esse sistema de três átomos já foi resolvido na Sec. 4.7.4, sendo a função de Green central dada pela Eq. (4.171), onde consideraremos $t_{21} = t_{32} = t$, $g_2 = g_0$ e $g_3 = \bar{G}_1$, onde obtemos

$$G_0 = \frac{g_0}{1 - 2|t|^2 g_0 \bar{G}_1}. \quad (4.160)$$

Utilizando a função de Green isolada da Eq. (4.143) e da Eq. (4.157), obtêm-se que

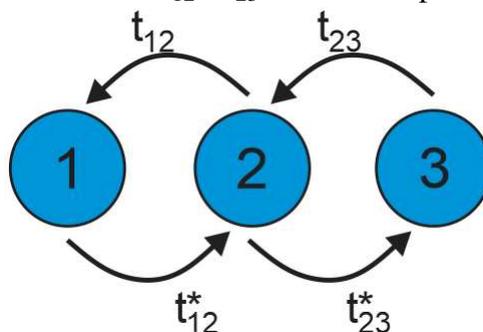
$$G_0 = \frac{-i}{2|t|} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{E - \varepsilon_0 + i\eta}{2|t|}\right)^2}}. \quad (4.161)$$

Note que a Eq. (4.161) apresenta uma singularidade no ponto $E - \varepsilon_0 = 2t$ que gera uma assíntota vertical com um pico tendendo para o infinito, podendo ser suavizados o entorno da singularidade através do parâmetro η . Observe ainda que para valores de $E - \varepsilon_0 < 2|t|$ iremos obter apenas partes imaginárias da função de Green, nos permitindo obter a densidade de estados como o inverso da Eq. (4.158) nos levando a obter um semicírculo investido com singularidades nas bordas. Isso é um resultado bastante comum para problemas com baixa dimensionalidade conhecidas como *singularidade de van Hove* (Sherkunov e Betouras, 2018).

4.7.4 Sistema com cadeia linear de três sítios

Agora iremos aplicar o método recursivo utilizando técnicas de decimação que consistem em mapear materiais a partir de camadas efetivas, onde a ideia é calcular as grandezas interativamente, em que recalculamos as funções de Green várias vezes em etapas distintas. Podendo ser utilizado para calcular um sistema infinito através de um sistema finito (Odashima *et al.*, 2017). Basicamente admitiremos inicialmente um sistema com três sítios, onde adicionaremos ao sistema outros dois sítios e posteriormente iremos determinar as funções de Green e mostrar que podemos ver esse novo sistema de cinco sítios como sendo um sistema de três sítios novamente, mas com as funções de Green efetivas, ver Fig. 48. Portanto o método de decimação seria repetir esse mesmo procedimento e retornar para um sistema de três sítios.

Figura 47 – (a) Representação para um sistema com três sítios, cujos parâmetros de acoplamento da esquerda para direita são t_{12} e t_{23} e da direita para esquerda são t_{12}^* e t_{23}^* .



Fonte: Elaborada pelo autor

Para isso, iremos considerar o sistema inicial de três sítios como está sendo ilustrado

na Fig. 47, onde os sítios são distintos e apresentam a mesma energia interna ε_i , sendo $i = 1, 2, 3, \dots$

Anteriormente vimos que um sistema de cadeia linear possui o Hamiltoniano da Eq. (4.132) que pode ser escrito para três átomos como

$$H = t_{21}c_1^\dagger c_2 + t_{12}c_2^\dagger c_1 + t_{32}c_2^\dagger c_3 + t_{23}c_3^\dagger c_2 + \sum_i^3 \varepsilon_0 c_i^\dagger c_i, \quad (4.162)$$

em que o primeiro termo corresponde a energia dos sítios individuais e as outras duas partes correspondem a energia de acoplamento entre os três sítios. Portanto, se sabemos o Hamiltoniano então podemos utilizar o mesmo método para obter a equação de movimento que já está explicitada na Eq. (4.135) e obter o propagador para o primeiro sítio

$$G_{11} = g_1 + g_1 t_{21} G_{21}, \quad (4.163)$$

e as funções de Green que estão relacionadas com o acoplamento com o sítio 1 devem ser dadas por

$$G_{21} = g_2 t_{21}^* G_{11} + g_2 t_{32} G_{31}, \quad (4.164a)$$

$$G_{31} = g_3 t_{32}^* G_{21}. \quad (4.164b)$$

Substituindo a Eq. (4.164b) na Eq. (4.164a), temos que

$$G_{21} = g_2 t_{21}^* G_{11} + g_2 t_{32} g_3 t_{32}^* G_{21}, \quad (4.165)$$

e reorganizando os termos, obtêm-se que

$$G_{21} = \frac{g_2 t_{21}^* G_{11}}{1 - g_2 t_{32} g_3 t_{32}^*}. \quad (4.166)$$

Substituindo-a na Eq. (4.163), temos que

$$G_{11} = g_1 + \frac{g_1 t_{21} g_2 t_{21}^* G_{11}}{1 - g_2 t_{32} g_3 t_{32}^*}, \quad (4.167)$$

e isolando o termo G_{11} , obtemos

$$G_{11} = \frac{g_1}{1 - \frac{g_1 t_{21} g_2 t_{21}^*}{1 - g_2 t_{32} g_3 t_{32}^*}}. \quad (4.168)$$

Note que podemos repetir o mesmo procedimento para o sítio 2, onde ao se utilizar a equação de movimento iremos obter

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{21}^* G_{12} + g_3 t_{32} G_{32}, \quad (4.169a)$$

$$G_{12} = g_1 t_{21} G_{22}, \quad (4.169b)$$

$$G_{32} = g_2 t_{32}^* G_{22}. \quad (4.169c)$$

Como as Eqs. (4.169b) e (4.169c) já estão em função do G_{22} , então devemos substituí-las diretamente na Eq. (4.169a) de forma que

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{21}^* g_1 t_{21} G_{22} + g_3 t_{32} g_3 t_{32}^* G_{22}. \quad (4.170)$$

Isolando G_{22} , temos que

$$G_{22} = \frac{g_2}{1 - g_2 t_{21}^* g_1 t_{21} - g_2 t_{32} g_3 t_{32}^*}. \quad (4.171)$$

No caso do sítio 3 vamos ter as seguintes equações

$$G_{33} = g_3 + g_3 t_{32}^* G_{23}, \quad (4.172a)$$

$$G_{23} = g_2 t_{32} G_{33} + g_2 t_{21}^* G_{13}, \quad (4.172b)$$

$$G_{13} = g_1 t_{21} G_{23}. \quad (4.172c)$$

Substituindo a Eq. (4.172c) na Eq. (4.172b), temos que

$$G_{23} = g_2 t_{32} G_{33} + g_2 t_{21}^* g_1 t_{21} G_{23}. \quad (4.173)$$

Isolando o termo G_{23} , obtemos

$$G_{23} = \frac{g_2 t_{32} G_{33}}{1 - g_2 t_{21}^* g_1 t_{21}}, \quad (4.174)$$

e aplicando na Eq. (4.172a), temos

$$G_{33} = g_3 + \frac{g_3 t_{32}^* g_2 t_{32} G_{33}}{1 - g_2 t_{21}^* g_1 t_{21}}, \quad (4.175)$$

onde

$$G_{33} = \frac{g_3}{1 - \frac{g_3 t_{32}^* g_2 t_{32}}{1 - g_2 t_{21}^* g_1 t_{21}}}. \quad (4.176)$$

Portanto, temos todos os elementos da matriz da função de Green do sistema para um problema da cadeia linear de três sítios. A partir disso, podemos agora utilizar o método da decimação para expandir nossos resultados para infinitos sítios.

É importante resaltar que as Eqs. (4.169a), (4.169b) e (4.169c) são as equações análogas as Eqs. (4.48b), (4.49a) e (4.49b), onde podemos substituir as Eqs. (4.169b) e (4.169c) na Eq. (4.169a) para obter

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{21}^* g_1 t_{21} G_{22} + g_3 t_{32} g_3 t_{32}^* G_{22}. \quad (4.177)$$

Assim, podemos notar que temos todas as equações para determinar cada elemento da matriz da função de Green.

4.8 Função de Green recursiva: Método da decimação da função de Green de superfície e superfície-bulk

4.8.1 Decimação da função de Green de superfície

Na literatura e em muitas publicações científicas, podem ser vistas inúmeros métodos para se calcular a função de Green e determinar as propriedades de transporte dentro de um determinado sistema. Tais como o método da função de Green recursiva por meio da decimação, onde a ideia consiste em ver um único átomo como uma divisão de múltiplos outros átomos, de forma que calculamos uma função de Green efetiva para todo o sistema (Sancho *et al.*, 1985).

A nossa ideia nesta seção é apresentar o método de decimação como é proposto nas referências (Sancho *et al.*, 1985),(Lewenkopf e Mucciolo, 2013),(Ryndyk *et al.*, 2016), onde consideraremos uma cadeia linear semi-infinita como apresentado na Fig. 44. Utilizaremos novamente a Eq. (4.135) de movimento e determinaremos as seguintes equações

$$G_{11} = g_1 + g_1 t_{21} G_{21}, \quad (4.178a)$$

$$G_{21} = g_2 t_{21}^* G_{11} + g_2 t_{32} G_{31}, \quad (4.178b)$$

$$G_{31} = g_3 t_{32}^* G_{21} + g_3 t_{43} G_{41}, \quad (4.178c)$$

⋮

$$G_{n1} = g_n t_{n,n-1}^* G_{n-1,1} + g_n t_{n+1,n} G_{n+1,1}. \quad (4.178d)$$

Aplicando a Eq. (4.178b) na Eq. (4.178a), iremos obter

$$G_{11} = g_1 + g_1 t_{21} (g_2 t_{21}^* G_{11} + g_2 t_{32} G_{31}), \quad (4.179)$$

onde

$$(g_1^{-1} - t_{21} g_2 t_{21}^*) G_{11} = t_{21} g_2 t_{32} G_{31}. \quad (4.180)$$

Note que está nos dando a função de Green G_{11} em termos das G_{31} , ou seja, é como se estivéssemos saltando a função de Green G_{21} . Podemos fazer isso de forma geral pegando as funções de Green $G_{n-1,1}$, G_{n1} e $G_{n+1,1}$, dadas por

$$G_{n-1,1} = g_{n-1} t_{n-1,n-2}^* G_{n-2,1} + g_{n-1} t_{n,n-1} G_{n,1}, \quad (4.181a)$$

$$G_{n1} = g_n t_{n,n-1}^* G_{n-1,1} + g_n t_{n+1,n} G_{n+1,1}, \quad (4.181b)$$

$$G_{n+1,1} = g_{n+1} t_{n+1,n}^* G_{n,1} + g_{n+1} t_{n+2,n+1} G_{n+2,1}, \quad (4.181c)$$

de forma que a Eq. (4.178d) fica

$$\begin{aligned} G_{n1} &= g_n t_{n,n-1}^* (g_{n-1} t_{n-1,n-2}^* G_{n-2,1} + g_{n-1} t_{n,n-1} G_{n,1}) \\ &+ g_n t_{n+1,n} (g_{n+1} t_{n+1,n}^* G_{n,1} + g_{n+1} t_{n+2,n+1} G_{n+2,1}), \end{aligned} \quad (4.182)$$

onde

$$\begin{aligned} (g_n^{-1} - t_{n,n-1}^* g_{n-1} t_{n,n-1} - t_{n+1,n} g_{n+1} t_{n+1,n}^*) G_{n1} &= \\ t_{n,n-1}^* g_{n-1} t_{n-1,n-2}^* G_{n-2,1} + t_{n+1,n} g_{n+1} t_{n+2,n+1} G_{n+2,1}. \end{aligned} \quad (4.183)$$

Podemos também escrever de uma forma mais conveniente para cálculos futuros, onde consideramos $g_i = g$, tal como

$$(E - \varepsilon_n + \eta) G_{n1} = \alpha_n G_{n-2,1} + \beta_n G_{n+2,1}, \quad (4.184)$$

definindo

$$\alpha_n = t_{n,n-1}^* g_{n-1} t_{n-1,n-2}^*, \quad (4.185a)$$

$$\beta_n = t_{n+1,n} g_{n+1} t_{n+2,n+1}, \quad (4.185b)$$

$$\bar{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + t_{n,n-1}^* g_n t_{n,n-1}, \quad (4.185c)$$

$$\varepsilon_n = \bar{\varepsilon}_n + t_{n+1,n} g_{n+1} t_{n+1,n}^*. \quad (4.185d)$$

Observe que este resultado sugere que podemos escrever a função de Green saltando os primeiros vizinhos, gerando uma relação recursiva envolvendo apenas os segundos vizinhos. Ou seja, podemos ver o sítio 1 em termo do sítio 3, o sítio 3 em termos dos sítios 1 e 5, até n que fica em função de $n - 2$ e $n + 2$, tal como

$$(E - \varepsilon_1 + i\eta) G_{11} = \alpha_1 G_{3,1} + I, \quad (4.186a)$$

$$(E - \varepsilon_2 + i\eta) G_{31} = \alpha_2 G_{5,1} + \beta_2 G_{1,1} \quad (4.186b)$$

$$(E - \varepsilon_3 + i\eta) G_{51} = \alpha_3 G_{7,1} + \beta_3 G_{3,1} \quad (4.186c)$$

⋮

$$(E - \varepsilon_n + i\eta) G_{n1} = \alpha_n G_{n-2,1} + \beta_n G_{n+2,1}. \quad (4.186d)$$

Observe que podemos repetir o mesmo procedimento anterior pela segunda vez para a n -ésima equação para os segundos vizinhos mais próximos, sendo dadas como

$$(E - \varepsilon_{n-2} + i\eta) G_{n-2,1} = \alpha_{n-2} G_{n-4,1} + \beta_n G_{n,1}, \quad (4.187a)$$

$$(E - \varepsilon_n + i\eta) G_{n1} = \alpha_n G_{n-2,1} + \beta_n G_{n+2,1}, \quad (4.187b)$$

$$(E - \varepsilon_{n+2} + i\eta) G_{n+2,1} = \alpha_{n+2} G_{n,1} + \beta_n G_{n+4,1}, \quad (4.187c)$$

e considerando $g_n^{(2)} = (E - \varepsilon_n + i\eta)^{-1}$, como sendo a função de Green efetiva para o n -ésimo sítio isolado.

Agora se substituirmos as Eqs. (4.187c) e (4.187a) na Eq. (4.187b), obtemos

$$(E - \varepsilon_n + \alpha_n g_{n-2} \beta_{n-2} - \beta_n g_{n+2} \alpha_{n+2}) G_{n1} = \alpha_n g_{n-4} \alpha_{n-2} G_{n-2,1} + \beta_n g_{n+4} \beta_{n+2}, \quad (4.188)$$

definindo

$$\alpha_n^{(2)} = \alpha_n g_{n-2} \alpha_{n-2}, \quad (4.189a)$$

$$\beta_n^{(2)} = \beta_n g_{n+2} \beta_{n+2}, \quad (4.189b)$$

$$\bar{\varepsilon}_n^{(2)} = \varepsilon_n + \alpha_n g_{n-2} \beta_{n-2}, \quad (4.189c)$$

$$\varepsilon_n^{(2)} = \bar{\varepsilon}_n + \beta_n g_{n+2} \alpha_{n+2}. \quad (4.189d)$$

Note que podemos fazer o mesmo procedimento anterior com as novas equações e obter G_{i1} em função de $G_{i-8,1}$ e G_{i+8} . Assim como podemos repetir esse procedimento m de forma que a relação recursiva possa envolver apenas os sítos múltiplos de 2^m , tal como

$$(E - \varepsilon_1 + \eta) G_{11} = \alpha_1 G_{3,1} + I, \quad (4.190a)$$

$$(E - \varepsilon_{2^m 2+1} + \eta) G_{2^m 1+1,1} = \alpha_{2^m 2+1} G_{2^m 2+1,1} + \beta_{2^m 2+1} G_{2^m 0+1,1}, \quad (4.190b)$$

$$(E - \varepsilon_{2^m 3+1} + \eta) G_{2^m 2+1,1} = \alpha_{2^m 3+1} G_{2^m 3+1,1} + \beta_{2^m 3+1} G_{2^m 1+1,1}, \quad (4.190c)$$

⋮

$$(E - \varepsilon_{2^m n+1} + \eta) G_{2^m (n+1)+1,1} = \alpha_{2^m n+1} G_{2^m (n+1)+1,1} + \beta_{2^m n+1} G_{2^m (n-1)+1,1}, \quad (4.190d)$$

onde podemos generalizar as equações efetivas para

$$\alpha_n^{(m)} = \alpha_n^{(m-1)} g_{n-2}^{(m-1)} \alpha_{n-2}^{(m-1)}, \quad (4.191a)$$

$$\beta_n^{(m)} = \beta_n^{(m-1)} g_{n+2}^{(m-1)} \beta_{n+2}^{(m-1)}, \quad (4.191b)$$

$$\bar{\varepsilon}_n^{(m)} = \varepsilon_n^{(m-1)} + \alpha_n^{(m-1)} g_{n-2}^{(m-1)} \beta_{n-2}^{(m-1)}, \quad (4.191c)$$

$$\varepsilon_n^{(m)} = \bar{\varepsilon}_n^{(m-1)} + \beta_n^{(m-1)} g_{n+2}^{(m-1)} \alpha_{n+2}^{(m-1)}. \quad (4.191d)$$

Note que podemos considerar os átomos e acoplamentos iguais e obter a forma das equações vistas nas referências (Lewenkopf e Mucciolo, 2013), (Odashima *et al.*, 2017) e na referência que deu origem ao método (Sancho *et al.*, 1985).

É importante ressaltar que este resultado consegue determinar funções efetivas que nos permite saltar as equações de alguns sítios em uma ordem de 2^m , em que podemos utilizar

essa ideia para reduzir um problema de múltiplos átomos para um problema com quantos átomos desejarmos, assim como iremos mostrar mais adiante, em que vamos adicionar átomos a um sistema de três sítios, utilizar decimação e reduzir o problema para três sítios novamente e repetir o procedimento novamente.

Note que se tornarmos m suficientemente grande a ponto que o parâmetro de acoplamento α_m tornar-se muito pequeno, iremos obter a função de Green para o sítio 1 isolado

$$G_{11} = (E - \varepsilon_1 + \eta)^{-1}. \quad (4.192)$$

4.8.2 Decimação da função de Green de superfície-bulk

4.8.2.1 Exemplo: Cadeia linear

A ideia consiste em adicionar um sítio em cada interação, como está sendo apresentado na Fig. 48(b). De forma que podemos tornar o sistema de três sítios em cinco sítios, sendo que as equações para o primeiro sítio podem ser dadas por

$$G_{11} = g_1 + g_1 t_{\bar{1}1} G_{\bar{1}1}, \quad (4.193a)$$

$$G_{\bar{1}1} = g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^* G_{11} + g_{\bar{1}} t_{2\bar{1}} G_{21}. \quad (4.193b)$$

Note que podemos substituir a Eq. (4.193b) na Eq. (4.193a) e eliminar o termo $G_{\bar{1}1}$ e obter uma equação efetiva para o sistema acoplado

$$G_{11} = g_1 + g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^* G_{11} + g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{2\bar{1}} G_{21}, \quad (4.194)$$

em que

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{g_1 + g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{2\bar{1}} G_{21}}{1 - g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^*} \\ &= \frac{g_1}{1 - g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^*} + \frac{g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{2\bar{1}}}{1 - g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^*} G_{21} \\ &= \bar{g}_1 + \bar{g}_1 \bar{t} G_{21}, \end{aligned} \quad (4.195)$$

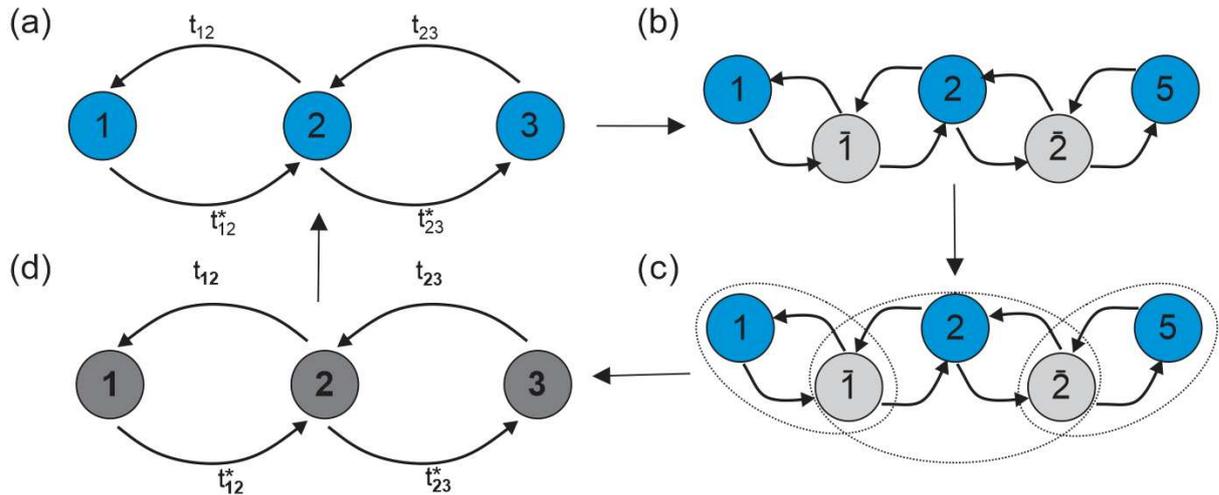
sendo

$$\bar{g}_1 = \frac{g_1}{1 - g_1 t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{1\bar{1}}^*} \quad \text{e} \quad \bar{t}_{21} = t_{\bar{1}1} g_{\bar{1}} t_{2\bar{1}}. \quad (4.196)$$

A Eq. (4.195) nos permite ver as interações dos sítios 1 e $\bar{1}$ como um único sítio efetivo que está interagindo com o sítio 2, cuja função de Green para esse sítio isolado seria a

Eq (4.196) com um parâmetro de acoplamento \bar{t} entre o novo sítio e o sítio 2. Podemos fazer o mesmo para o sítio 2, em que as equações devem ser dadas por

Figura 48 – Esquema representando o funcionamento do método da decimação, onde o método começa com (a) três sítios, (b) adiciona mais dois sítios entre as interações, (c) envolve os sítios que podem ser vistos como um único sítio efetivo e (d) retorna a forma de três sítios iniciais e recomeça o processo voltando para o (b).



Fonte: Elaborada pelo autor

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{2\bar{1}}^* G_{\bar{1}2} + g_2 t_{2\bar{2}}^* G_{\bar{2}2}, \quad (4.197a)$$

$$G_{\bar{1}2} = g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} G_{22} + g_{\bar{1}t_{1\bar{1}}}^* G_{12}, \quad (4.197b)$$

$$G_{\bar{2}2} = g_{\bar{2}t_{3\bar{2}}} G_{32} + g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^* G_{22}. \quad (4.197c)$$

Agora podemos eliminar os termos $G_{\bar{1}2}$ e $G_{\bar{2}2}$ substituindo as Eqs. (4.197b) e (4.197c) na Eq. (4.197a), obtendo

$$G_{22} = g_2 + g_2 t_{2\bar{1}}^* (g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} G_{22} + g_{\bar{1}t_{1\bar{1}}}^* G_{12}) + g_2 t_{2\bar{2}}^* (g_{\bar{2}t_{3\bar{2}}} G_{32} + g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^* G_{22}), \quad (4.198)$$

e reorganizando a equação, obtemos

$$\begin{aligned} G_{22} &= \frac{g_2 + g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{1\bar{1}}}^* G_{12} + g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{3\bar{2}}} G_{32}}{1 - g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} - g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^*} \\ &= \frac{g_2}{1 - g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} - g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^*} + \frac{g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{1\bar{1}}}^*}{1 - g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} - g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^*} G_{12} \\ &\quad + \frac{g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{3\bar{2}}}}{1 - g_2 t_{2\bar{1}}^* g_{\bar{1}t_{2\bar{1}}} - g_2 t_{2\bar{2}}^* g_{\bar{2}t_{2\bar{2}}}^*} G_{32} \\ &= \bar{g}_2 + \bar{g}_2 \bar{t}^* G_{12} + \bar{g}_2 \bar{t} G_{32}, \end{aligned} \quad (4.199)$$

onde

$$\bar{g}_2 = \frac{g_2}{1 - g_2 t_{21}^* g_1 t_{21} - g_2 t_{22} g_2 t_{22}^*}, \quad \bar{t}_{21}^* = t_{21}^* g_1 t_{11}^* \quad \text{e} \quad \bar{t}_{23} = t_{22} g_2 t_{32}^*. \quad (4.200)$$

Agora podemos fazer também para o sítio 3, em que as equações podem ser dadas por

$$G_{33} = g_3 + g_3 t_{32}^* G_{23} \quad (4.201a)$$

$$G_{23} = g_2 t_{32} G_{33} + g_2 t_{22}^* G_{23}. \quad (4.201b)$$

Substituindo a Eq. (4.201b) na Eq. (4.201a), obtemos

$$G_{33} = g_3 + g_3 t_{32}^* (g_2 t_{32} G_{33} + g_2 t_{22}^* G_{23}). \quad (4.202)$$

Reorganizando as equações, obtemos

$$\begin{aligned} G_{33} &= \frac{g_3 + g_3 t_{32}^* g_2 t_{22}^* G_{23}}{1 - g_3 t_{32}^* g_2 t_{32}} \\ &= \frac{g_3}{1 - g_3 t_{32}^* g_2 t_{32}} + \frac{g_3 t_{32}^* g_2 t_{22}^*}{1 - g_3 t_{32}^* g_2 t_{32}} G_{23} \\ &= \bar{g}_3 + \bar{g}_3 \bar{t}^* G_{23}, \end{aligned} \quad (4.203)$$

onde

$$\bar{g}_3 = \frac{g_3}{1 - g_3 t_{32}^* g_2 t_{32}} \quad \text{e} \quad \bar{t}_{32}^* = t_{32}^* g_2 t_{22}^*. \quad (4.204)$$

As Eqs. (4.195), (4.199) e (4.203) são análogas as Eqs. (4.163), (4.169a) e (4.172a), ou seja, temos três novas equações que substituem um problema de cinco sítios para um sistema efetivo de três sítios, onde as Eqs. (4.196), (4.200) e (4.204) são as funções para os novos sítios isolados e para os termos de acoplamento. Uma vez que temos as equações para um sistema efetivo de três sítios, podemos ainda obter as equações análogas as Eq. (4.168), (4.171) e (4.176) que foram obtidas na Subs. 4.7.4, sendo dadas por

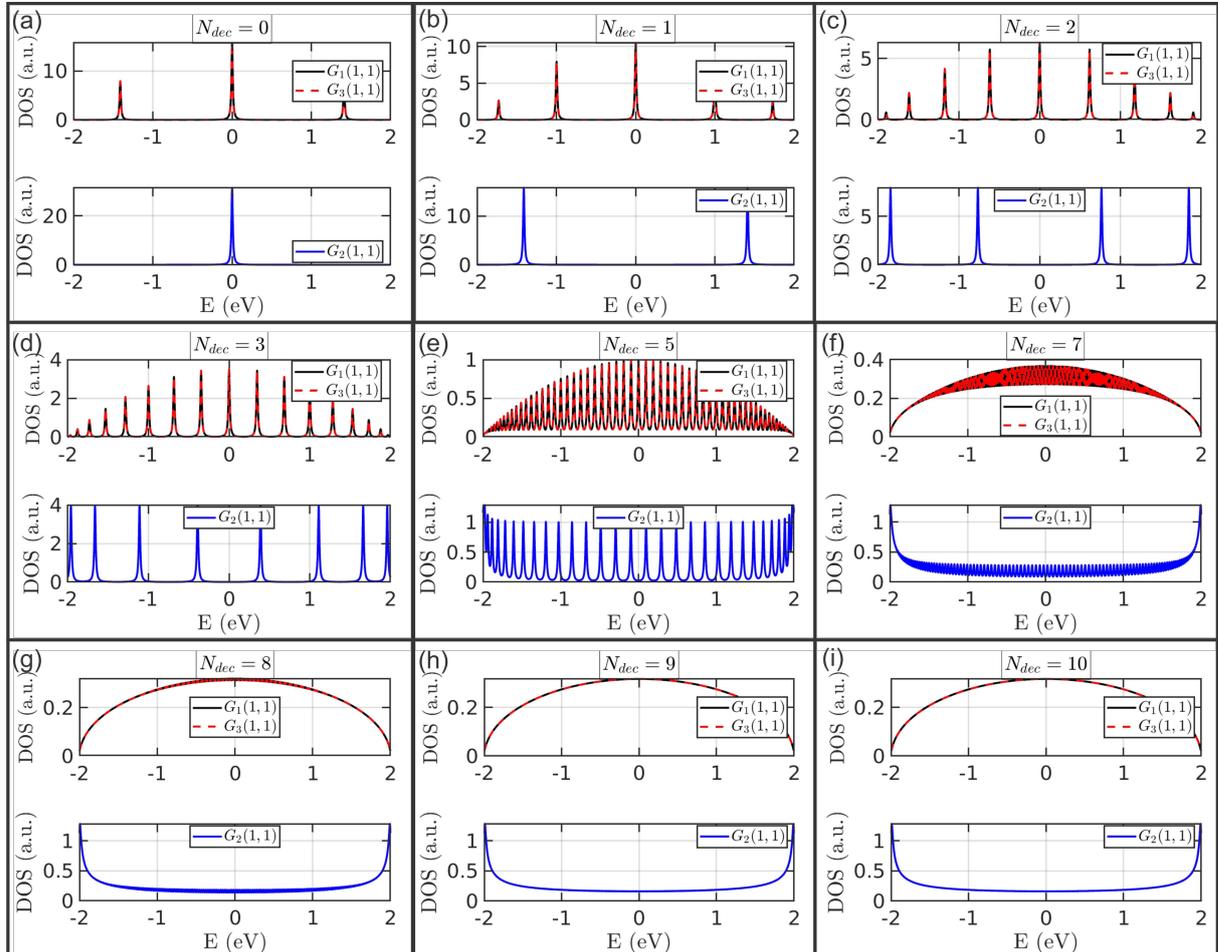
$$G_{11} = \frac{\bar{g}_1}{1 - \frac{\bar{g}_1 \bar{t}_{21} \bar{g}_2 t_{21}^*}{1 - \bar{g}_2 \bar{t}_{32} \bar{g}_3 t_{32}^*}}, \quad (4.205a)$$

$$G_{22} = \frac{\bar{g}_2}{1 - \bar{g}_2 t_{21}^* \bar{g}_1 \bar{t}_{21} - \bar{g}_2 \bar{t}_{32} \bar{g}_3 t_{32}^*}, \quad (4.205b)$$

$$G_{33} = \frac{\bar{g}_3}{1 - \frac{\bar{g}_3 t_{32}^* \bar{g}_2 t_{32}}{1 - \bar{g}_2 t_{21}^* \bar{g}_1 \bar{t}_{21}}}. \quad (4.205c)$$

Note que para cada decimação teremos o adicional de dois sítios, se considerarmos apenas uma decimação teremos ao todo cinco sítios. Agora se quisermos determinar a transmissão

Figura 49 – Resultados das densidades de estados de superfície e *bulk* (painel superior e inferior) para $N = 0$ até $N = 8$, mostrando o crescimento do número de picos até chegar no resultado da cadeia linear semi-infinita e infinita da Fig. 45, obtidos a partir das funções de Green de superfície ($G_1(1,1)$ e $G_3(1,1)$) e função de Green de *bulk* ($G_2(1,1)$).



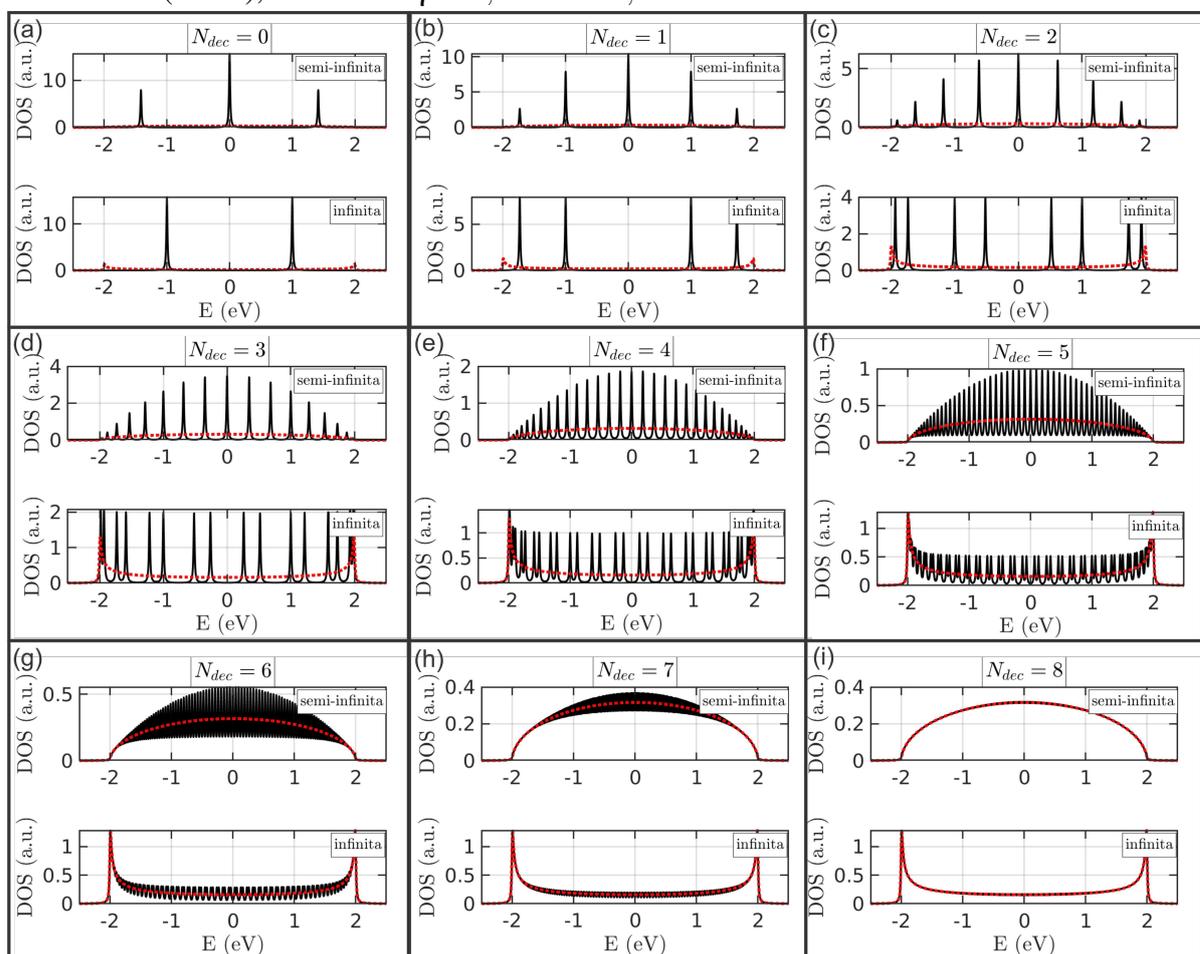
Fonte: Elaborada pelo autor

através desses cinco sítios, para isso devemos acoplar nosso sistema efetivo com dois *Leads* que funciona como a adição de dois novos sítios de superfície. Note ainda que a Eq. (4.205b) é análoga a Eq. (4.53) que pode ser escrita por

$$\left((\bar{g}_2)^{-1} - \bar{t}_{21}^* \bar{g}_1 \bar{t}_{21} - \bar{t}_{32} \bar{g}_3 \bar{t}_{32}^* \right) G_{22} = 1. \quad (4.206)$$

Em geral, podemos notar que este método nos permite aumentar o número de sítios e sempre escrever esse aumento em termos de três sítios com interações efetivas, onde ao repetirmos uma quantidade suficientemente grande, podemos retomar os resultados para um sistema infinito, como esta sendo mostrado na Fig. 45, na qual é apresentado o crescimento do número de sítios através da decimação, onde $N = 0$ nos trás novamente ao caso específico de três sítios estudado na Sec. 4.7.4. Neste caso podemos ver o aparecimento dos três picos na

Figura 50 – Resultados das densidades de estados da cadeia semi-infinita (painel superior) e infinita (painel inferior) para $N = 0$ até $N = 8$, comparando os resultados da decimação (linha preta) com o resultado analítico (linha tracejada vermelha) das Eqs.(4.157) e (4.159), utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1,0$.



Fonte: Elaborada pelo autor

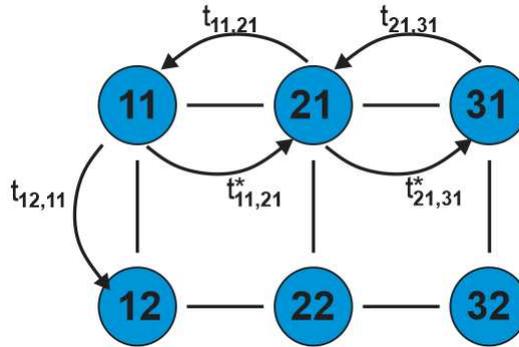
densidade de estado de superfície devido aos três sítios.

Agora se aumentarmos o número de sítios, podemos observar o formato semicircular dos casos infinitos (dados pela função de Green *bulk*) e semifinitos (pela função de Green de superfície) que obtivemos anteriormente e podemos comparar as Fig. 45 com a Fig. 50 e notar que a parte da função de Green de *bulk* tem uma maior contribuição para a densidade de estados do sistema. É interessante também notar que ao fazermos a densidade local de estados do sistema infinito para as funções de Green de superfície iremos obter exatamente o resultado para os casos semi-infinitos, como podemos ver em ambas as Figs. 45) e 50.

4.8.2.2 Exemplo: Cadeia escada

Note que até o momento estávamos estudando problemas unidimensionais, mas podemos estender o método recursivo aplicando a decimação para obter um problema bidimensional. Para iniciarmos o nosso estudo, iremos considerar duas cadeias lineares de três átomos sobrepostas uma sobre a outra como apresentado na Fig. 51.

Figura 51 – Sistema bidimensional com seis sítios dispostos em duas camadas de três sítios, chamado aqui de sistema bidimensional escada.



Fonte: Elaborada pelo autor

Assim iremos estar considerando que os elétrons podem se movimentar tanto na horizontal quanto na vertical, ou seja, elétrons que estão no átomo 11 podem visitar os primeiros vizinhos 21 e 12. Por conveniência iremos adotar que o parâmetro $t_{ij,i'j'}$ é o acoplamento do átomo $i'j'$ com o sítio ij da direita para esquerda. De forma que utilizaremos notação $G_{ij,i'j'}$ para representar a função de Green como notação padrão, onde ij corresponde aos sítios que estamos avaliando e $i'j'$ corresponde aos sítios que estão sendo associados, por exemplo, $G_{11,12}$ se refere ao propagador de conexão entre os sítios 11 e 12.

Para compreender o método de cadeia linear bidimensional, iremos considerar a Fig. 51, onde consideramos três colunas com dois átomos cada. O primeiro passo que deve ser tomado é a generalização da equação de movimento das subseções anteriores, ver Eq. (4.135). Dessa forma, devemos utilizar um Hamiltoniano mais geral dado por

$$\begin{aligned}
 H &= H_{pot} + H_{cin} \\
 &= \sum_{ij} \epsilon_{ij} c_{ij}^\dagger c_{ij} + \sum_{ij} \left[\left(t_{(i+1,j),ij} c_{ij}^\dagger c_{i+1,j} - t_{ij,(i+1,j)} c_{ij}^\dagger c_{(i+1,j),ij} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \left(t_{(i,j+1),ij} c_{ij}^\dagger c_{i,j+1} - t_{ij,(i,j+1)} c_{ij}^\dagger c_{i,j+1} \right) \right], \tag{4.207}
 \end{aligned}$$

onde os comutadores podem ser dados por

$$[c_{mn}, H_{pot}] = \sum_{ij} \varepsilon_{ij} [c_{mn}, c_{ij}^\dagger c_{i,j}] = \sum_i \varepsilon_{ij} \delta_{ij, mn} c_{ij} = \varepsilon_{mn} c_{mn}, \quad (4.208a)$$

$$\begin{aligned} [c_{mn}, H_{cin}] &= \sum_{ij} \left[\left(t_{(i+1,j),ij} [c_{mn}, c_{ij}^\dagger c_{i+1,j}] + t_{ij,(i+1,j)} [c_{mn}, c_{i+1,j}^\dagger c_{ij}] \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(t_{(i,j+1),ij} [c_{mn}, c_{ij}^\dagger c_{i,j+1}] + t_{ij,(i,j+1)} [c_{mn}, c_{i,j+1}^\dagger c_{ij}] \right) \right] \\ &= \sum_{ij} \left[\left(t_{(i+1,j),ij} \delta_{ij, mn} c_{i+1,j} + t_{ij,(i+1,j)} \delta_{(i+1,j), mn} c_{ij} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(t_{(i,j+1),ij} \delta_{ij, mn} c_{i,j+1} + t_{ij,(i,j+1)} \delta_{(i,j+1), mn} c_{ij} \right) \right] \\ &= (t_{(m+1,n),mn} c_{m+1,n} + t_{(m-1,n),mn} c_{m-1,n}) \\ &\quad + (t_{(m,n+1),mn} c_{m,n+1} + t_{(m,n-1),mn} c_{m,n-1}) \\ &= \sum_{k=\pm 1} (t_{(m+k,n),mn} c_{m+k,n} + t_{(m,n+k),mn} c_{m,n+k}). \end{aligned} \quad (4.208b)$$

Se aplicarmos na equação cinética, iremos poder generalizar a Eq. (4.135), tal como

$$\begin{aligned} EG_{ij,i'j'}^r &= \delta_{ij,i'j'} + \left\langle \left\langle [c_{ij}, H] ; c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle \\ &= \delta_{ij,i'j'} + \left\langle \left\langle [c_{ij}, H_{pot}] ; c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle [c_{ij}, H_{cin}] ; c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle \\ &= \delta_{ij,i'j'} + \varepsilon_{ij} \left\langle \left\langle c_{ij} c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle + \sum_{k=\pm 1} \left(t_{(i+k,j),ij} \left\langle \left\langle c_{i+k,j} c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle + t_{(i,j+k),ij} \left\langle \left\langle c_{i,j+k} c_{i'j'}^\dagger \right\rangle \right\rangle \right) \\ &= \delta_{ij,i'j'} + \varepsilon_{ij} G_{ij,i'j'} + \sum_{k=\pm 1} \left(t_{(i+k,j),ij} G_{(i+k,j),i'j'} + t_{(i,j+k),ij} G_{(i,j+k),i'j'} \right), \end{aligned} \quad (4.209)$$

onde

$$(E - \varepsilon_{ij} + i\eta) G_{ij,i'j'} = \delta_{ij,i'j'} + \sum_{k=\pm 1} \left(t_{(i+k,j),ij} G_{(i+k,j),i'j'} + t_{(i,j+k),ij} G_{(i,j+k),i'j'} \right). \quad (4.210)$$

Note que se utilizarmos a equação de movimento no primeiro sítio 11, obteremos um propagador com contribuições dos termos $G_{21,11}$ e $G_{12,11}$, onde podemos escrever

$$G_{11,11} = g_{11} + g_{11} t_{21,11} G_{21,11} + g_{11} t_{11,12}^* G_{12,11}, \quad (4.211a)$$

$$G_{12,12} = g_{12} + g_{12} t_{11,12} G_{11,12} + g_{12} t_{22,12} G_{22,12}, \quad (4.211b)$$

$$G_{11,12} = g_{11} t_{11,12}^* G_{12,12} + g_{11} t_{21,11} G_{21,12}, \quad (4.211c)$$

$$G_{12,11} = g_{12} t_{11,12} G_{11,11} + g_{12} t_{22,12} G_{22,11}. \quad (4.211d)$$

Organizando na forma matricial, podemos obter

$$\begin{pmatrix} G_{11,11} & G_{11,12} \\ G_{12,11} & G_{12,12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 \\ 0 & g_{12} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_{11} & 0 \\ 0 & g_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_{11,12}^* \\ t_{11,12} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11,11} & G_{11,12} \\ G_{12,11} & G_{12,12} \end{pmatrix} \\ + \begin{pmatrix} g_{11} & 0 \\ 0 & g_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{21,11} & 0 \\ 0 & t_{22,11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{21,11} & G_{21,12} \\ G_{22,11} & G_{22,12} \end{pmatrix}, \quad (4.212)$$

em que podemos escrever

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_1 \mathbf{V} \mathbf{G}_1 + \mathbf{g}_1 \mathbf{W}_1 \mathbf{G}_{21}, \quad (4.213)$$

sendo

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} G_{11,11} & G_{11,12} \\ G_{12,11} & G_{12,12} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_{21} = \begin{pmatrix} G_{21,11} & G_{21,12} \\ G_{22,11} & G_{22,12} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 \\ 0 & g_{12} \end{pmatrix}, \quad (4.214)$$

e

$$\mathbf{V}_1 = \begin{pmatrix} 0 & t_{11,12}^* \\ t_{11,12} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{W}_1 = \begin{pmatrix} t_{21,11} & 0 \\ 0 & t_{22,11} \end{pmatrix}. \quad (4.215)$$

A Eq. (4.213) está voltada para descrever apenas a cadeia linear superior, onde novamente podemos normalizar esta equação para obter algo semelhante a Eq. (4.163) de um sistema de cadeia linear para três átomos

$$\mathbf{G}_1 = \bar{\mathbf{g}}_1 + \bar{\mathbf{g}}_1 \mathbf{W}_1 \mathbf{G}_{21}, \quad (4.216)$$

em que

$$\bar{\mathbf{g}}_1 = [1 - \mathbf{g}_1 \mathbf{V}_1]^{-1} \mathbf{g}_1. \quad (4.217)$$

Observe que possuímos uma equação semelhante aquela obtida para o caso de três sítios, mas aqui temos uma equação em forma matricial, nos permitindo estudar com mais facilidade um sistema bidimensional. Isso mostra que podemos realizar um mapeamento de um sistema bidimensional em um problema de três sítios, onde cada coluna pode ser vista como um sítio, ver Fig. 51. Portanto devemos determinar as equações efetivas na forma matricial para a segunda coluna, onde podemos escrever

$$G_{21,21} = g_{21} + g_{21} t_{21,11}^* G_{11,21} + g_{21} t_{21,22}^* G_{22,21} + g_{21} t_{31,21} G_{31,21}, \quad (4.218a)$$

$$G_{22,22} = g_{22} + g_{22} t_{22,12}^* G_{12,22} + g_{22} t_{21,22} G_{21,22} + g_{22} t_{32,22} G_{32,22}, \quad (4.218b)$$

$$G_{21,22} = g_{21} t_{22,11}^* G_{11,22} + g_{21} t_{22,21} G_{22,22} + g_{21} t_{31,21} G_{31,22}, \quad (4.218c)$$

$$G_{22,21} = g_{22} t_{22,12}^* G_{12,21} + g_{22} t_{21,22} G_{21,21} + g_{22} t_{32,22} G_{32,21}, \quad (4.218d)$$

e colocando na forma matricial, obtemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} G_{21,21} & G_{21,22} \\ G_{22,21} & G_{22,22} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} g_{21} & 0 \\ 0 & g_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_{21} & 0 \\ 0 & g_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_{21,22}^* \\ t_{21,22} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{21,21} & G_{21,22} \\ G_{22,21} & G_{22,22} \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} g_{21} & 0 \\ 0 & g_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{21,11}^* & 0 \\ 0 & t_{22,12}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11,21} & G_{11,22} \\ G_{12,21} & G_{12,22} \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} g_{21} & 0 \\ 0 & g_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{31,21} & 0 \\ 0 & t_{32,22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{31,21} & G_{31,22} \\ G_{32,21} & G_{32,22} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.219)$$

Portanto podemos escrever a equação efetiva da coluna 2 como

$$\mathbf{G}_2 = \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_2 \mathbf{V}_2 \mathbf{G}_2 + \mathbf{g}_2 \mathbf{W}_2^* \mathbf{G}_{12} + \mathbf{g}_2 \mathbf{W}_2 \mathbf{G}_{32}, \quad (4.220)$$

e renormalizando podemos obter

$$\mathbf{G}_2 = \bar{\mathbf{g}}_2 + \bar{\mathbf{g}}_2 \mathbf{W}_2^* \mathbf{G}_{12} + \bar{\mathbf{g}}_2 \mathbf{W}_2 \mathbf{G}_{32}, \quad (4.221)$$

em que

$$\mathbf{V}_2 = \begin{pmatrix} 0 & t_{21,22}^* \\ t_{21,22} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W}_2 = \begin{pmatrix} t_{31,21} & 0 \\ 0 & t_{32,22} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{\mathbf{g}}_2 = (1 - g_2 \mathbf{V}_2)^{-1} g_3. \quad (4.222)$$

Para a coluna três, devemos ter as equações

$$G_{31,31} = g_{31} + g_{31} t_{32,31} G_{32,31} + g_{11} t_{31,21}^* G_{21,31}, \quad (4.223a)$$

$$G_{32,32} = g_{12} + g_{12} t_{31,32} G_{31,32} + g_{12} t_{22,32} G_{22,32}, \quad (4.223b)$$

$$G_{31,32} = g_{11} t_{32,31}^* G_{32,32} + g_{11} t_{21,32} G_{21,32}, \quad (4.223c)$$

$$G_{32,31} = g_{12} t_{31,32} G_{31,31} + g_{12} t_{22,32} G_{22,31}, \quad (4.223d)$$

e em sua forma matricial, tem-se que

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} G_{31,31} & G_{31,32} \\ G_{32,31} & G_{32,32} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} g_{31} & 0 \\ 0 & g_{32} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_{31} & 0 \\ 0 & g_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_{31,32}^* \\ t_{31,32} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{31,31} & G_{31,32} \\ G_{32,31} & G_{32,32} \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} g_{31} & 0 \\ 0 & g_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{31,21} & 0 \\ 0 & t_{32,22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{21,31} & G_{21,32} \\ G_{22,31} & G_{22,32} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.224)$$

onde

$$\mathbf{G}_3 = \mathbf{g}_3 + \mathbf{g}_3 \mathbf{V}_3 \mathbf{G}_3 + \mathbf{g}_3 \mathbf{W}_3 \mathbf{G}_{23}. \quad (4.225)$$

Renormalizando-a podemos obter

$$\mathbf{G}_3 = \bar{\mathbf{g}}_3 + \bar{\mathbf{g}}_3 \mathbf{W} \mathbf{G}_{23}, \quad (4.226)$$

onde definiu-se que

$$\mathbf{V}_3 = \begin{pmatrix} 0 & t_{31,32}^* \\ t_{31,32} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W}_3 = \begin{pmatrix} t_{31,21} & 0 \\ 0 & t_{32,22} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{\mathbf{g}}_3 = (1 - g_3 \mathbf{V}_3)^{-1} g_3. \quad (4.227)$$

Note que as Eqs. (4.216), (4.221) e (4.226) são análogas às Eqs. (4.195), (4.199) e (4.203) para o caso de três sítios. Isso nos permite novamente mapear o sistema bidimensional para um sistema de três sítios com as equações efetivas citadas.

Agora podemos achar os demais elementos da matriz, tal como as matrizes \mathbf{G}_{32} e \mathbf{G}_{12} , assim devemos novamente escrever cada elemento dessa matriz através da Eq. (4.135) e obter

$$G_{11,21} = g_{11} t_{21,11} G_{21,21} + g_{11} t_{12,11} G_{12,21}, \quad (4.228a)$$

$$G_{11,22} = g_{11} t_{21,11} G_{21,22} + g_{11} t_{12,11} G_{12,22}, \quad (4.228b)$$

$$G_{12,21} = g_{12} t_{22,12} G_{22,21} + g_{12} t_{11,12} G_{11,21}, \quad (4.228c)$$

$$G_{12,22} = g_{12} t_{22,12} G_{22,22} + g_{12} t_{11,12} G_{11,22}, \quad (4.228d)$$

para os elementos de \mathbf{G}_{12} e

$$G_{31,21} = g_{31} t_{21,31} G_{21,21} + g_{11} t_{32,31} G_{32,21}, \quad (4.229a)$$

$$G_{31,22} = g_{31} t_{21,31} G_{21,22} + g_{11} t_{32,31} G_{32,22}, \quad (4.229b)$$

$$G_{32,21} = g_{32} t_{22,32} G_{22,21} + g_{32} t_{31,32} G_{31,21}, \quad (4.229c)$$

$$G_{32,22} = g_{32} t_{22,32} G_{22,22} + g_{12} t_{31,32} G_{31,22}, \quad (4.229d)$$

para os elementos de \mathbf{G}_{32} .

Organizando os termos dessas equações em uma forma matricial, podemos escrever

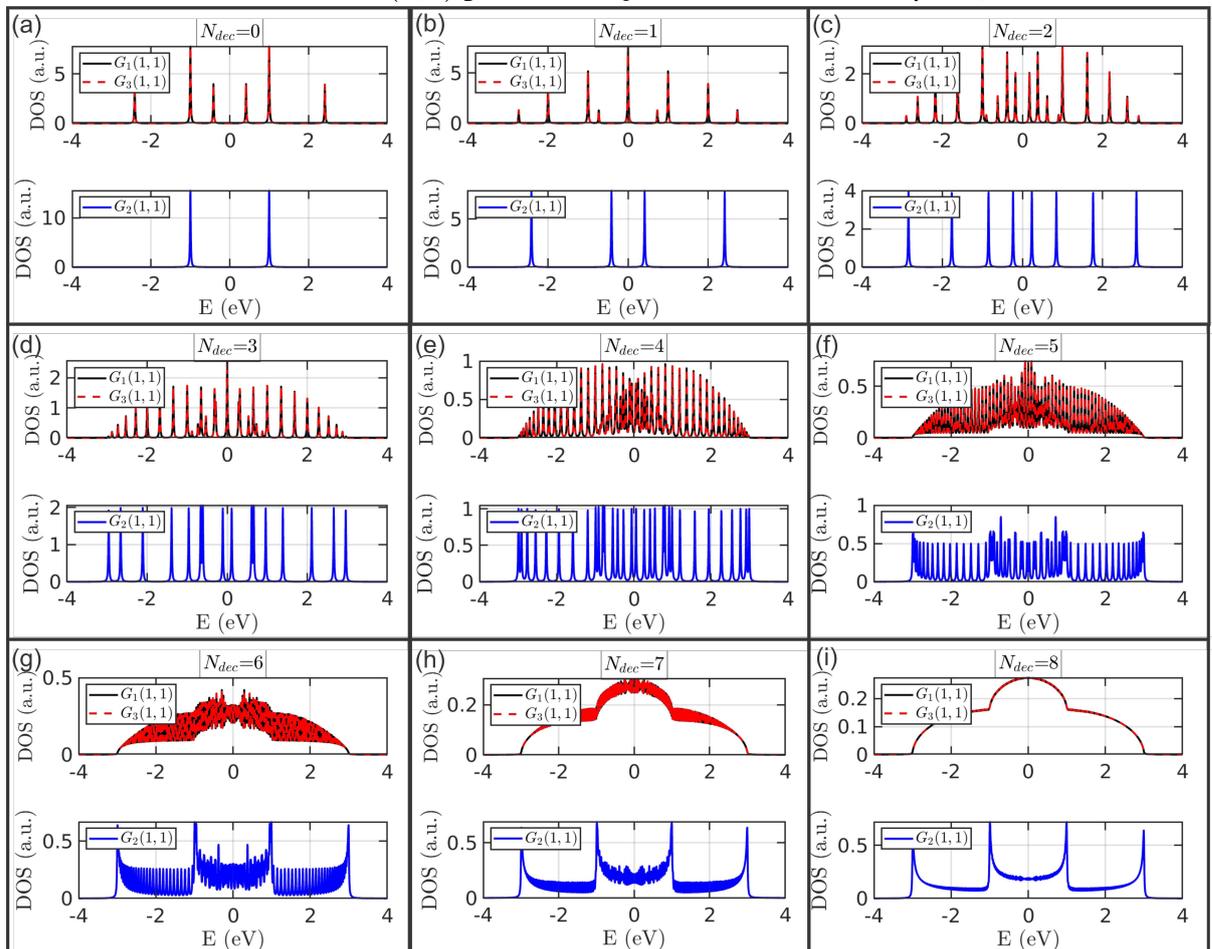
$$\mathbf{G}_{12} = \bar{\mathbf{g}}_1 \mathbf{W}_{21} \mathbf{G}_2, \quad (4.230a)$$

$$\mathbf{G}_{32} = \bar{\mathbf{g}}_3 \mathbf{W}_{32} \mathbf{G}_2. \quad (4.230b)$$

Substituindo as Eqs. (4.230a) e (4.230b) na Eq. (4.221), obtemos

$$\mathbf{G}_2 = \bar{\mathbf{g}}_2 + \bar{\mathbf{g}}_2 \mathbf{W}_{21}^* \bar{\mathbf{g}}_1 \mathbf{W}_{21} \mathbf{G}_2 + \bar{\mathbf{g}}_2 \mathbf{W}_{32}^* \bar{\mathbf{g}}_3 \mathbf{W}_{32} \mathbf{G}_2, \quad (4.231)$$

Figura 52 – Resultado da densidade de estados de superfície (painel superior) e *bulk* (painel inferior) para o caso da cadeia escada, considerando valores de $N = 0$ até $N = 8$, obtidos a partir das funções de Green de superfície $G_1(1,1)$ e $G_3(1,1)$ e função de Green de *bulk* $G_2(1,1)$ para decimação escada utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1$.



Fonte: Elaborada pelo autor

e reorganizando-a, temos que

$$\left[(\bar{\mathbf{g}}_3)^{-1} - \mathbf{W}_{21}^* \bar{\mathbf{g}}_1 \mathbf{W}_{21} - \mathbf{W}_{32}^* \bar{\mathbf{g}}_3 \mathbf{W}_{32} \right] \mathbf{G}_3 = I. \quad (4.232)$$

Podemos ver novamente que utilizamos o método de decimação, onde mapeamos o sistema em uma cadeia de três sítios como feito anteriormente. É interessante observar que ao aumentarmos o número de colunas, iremos obter um sistema de duas cadeia infinitas acopladas, na qual podemos analisar a densidade de estados de superfície e *bulk*, mostrado na Fig. 52, em que ao analisarmos a densidade de estados de superfície, iremos retomar a forma do círculo do sistema semi-infinito, entretanto composto por um semi-círculo sobre outro semicirculo maior, devido a contribuição das duas cadeias semi-infinitas vistas pelas superfícies. O mesmo ocorre para a forma do gráfico para a densidade de *bulk* retirado a partir da densidade local da função de Green central ou de *bulk*, ganhando a forma com um semi-círculo no interior de outro

semi-círculo maior investido com as bordas admitindo singularidades semelhantes ao visto para a cadeia linear infinita, podendo ser entendido como quatro pontos de singularidades das quais dois vem de uma cadeia infinita e a outra da outra cadeia infinita das duas camadas.

4.8.2.3 Exemplo: Rede quadrada

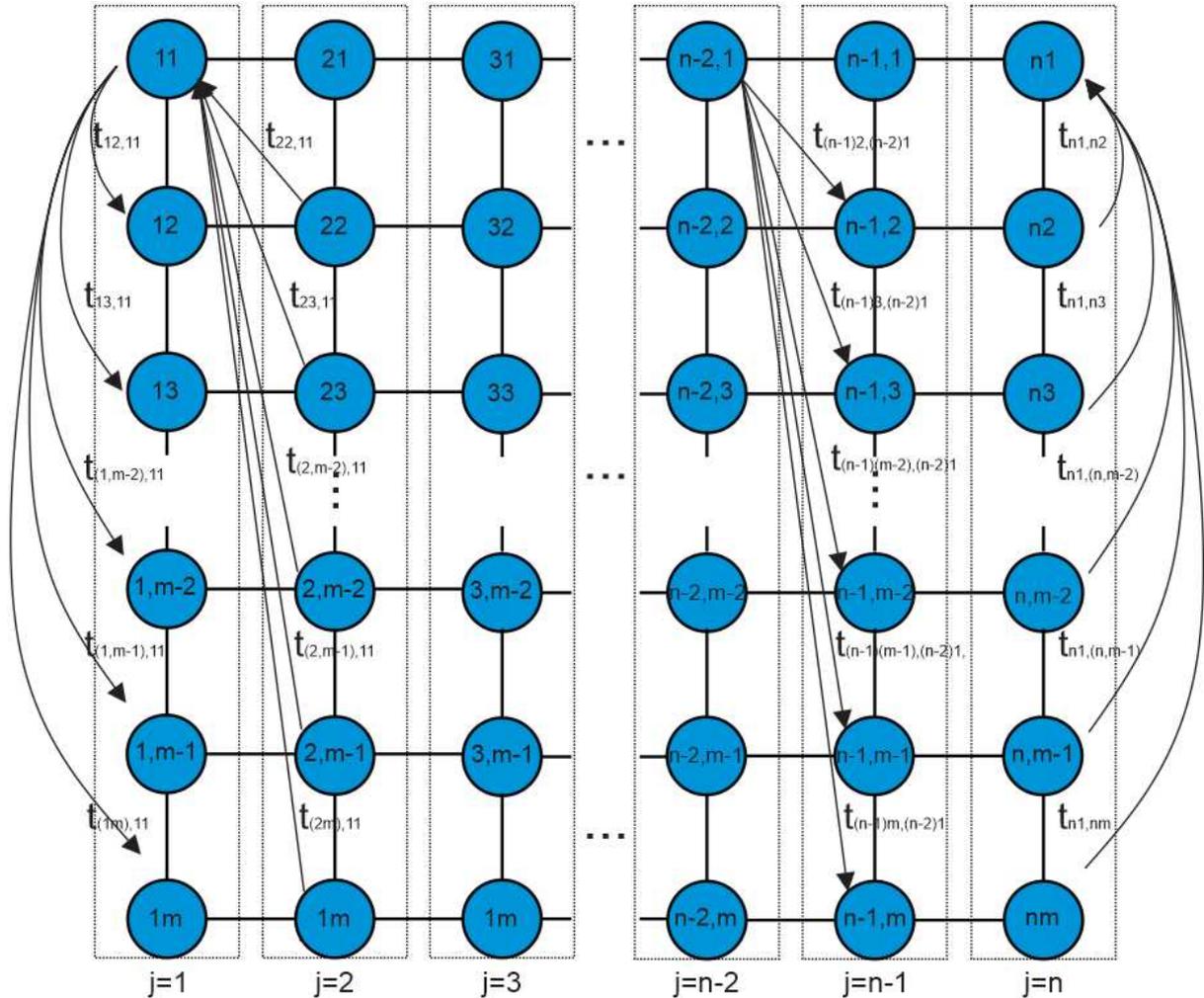
Na seção anterior consideramos um caso particular para uma rede quadrada, onde consideramos duas camadas com três átomos cada. Agora pretendemos generalizar o resultado para uma rede quadrada com o número de camadas e colunas quaisquer, assim como está sendo representado na Fig. 53.

Observe que estamos considerando não apenas a interação com os primeiros vizinhos, mas estamos generalizando para interações com quaisquer vizinhos. Isso nos permite ver que a matrix V_n possui todos os elementos, diferente do mostrado na Eq. (4.214) que apresenta apenas uma matriz tridiagonal. Na linha dessa matriz iremos ter os elementos dentro da mesma linha correspondendo aos *hoppings* saindo sempre do sítio nm que estamos analisando para todos os outros sítios que estão na mesma coluna da célula apresentada na Fig. 53, isto é $t_{nm,n'm'}$ se refere o acoplamento do sítio $n'm'$ para todos os sítios nm , ver Eq. (4.233). Para a linha da matriz, iremos ter todos o acoplamento de todos os sítios com o átomo que estamos analisando, ou seja, podemos obter a seguinte matriz

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} t_{j1,j1} & t_{j1,j2}^* & t_{j1,j3}^* & \cdots & t_{j1,j(m-2)}^* & t_{j1,j(m-1)}^* & t_{j1,jm}^* \\ t_{j1,j2} & t_{j2,j2} & t_{j2,j3}^* & \cdots & t_{j2,j(m-2)}^* & t_{j2,j(m-1)}^* & t_{j2,jm}^* \\ t_{j1,j3} & t_{j2,j3} & t_{j3,j3} & \cdots & t_{j3,j(m-2)}^* & t_{j3,j(m-1)}^* & t_{j3,jm}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ t_{j1,j(m-2)} & t_{j2,j(m-2)} & t_{j3,j(m-2)} & \cdots & t_{j(m-2),j(m-2)} & t_{j(m-1),j(m-2)} & t_{jm,j(m-2)} \\ t_{j1,j(m-1)} & t_{j2,j(m-1)} & t_{j3,j(m-1)}^* & \cdots & t_{j(m-2),j(m-1)} & t_{j(m-1),j(m-1)} & t_{jm,j(m-1)} \\ t_{j1,jm} & t_{j2,jm} & t_{j3,jm} & \cdots & t_{j(m-2),jm} & t_{j(m-1),jm} & t_{jm,jm} \end{pmatrix}. \quad (4.233)$$

Em relação a matriz $W_{j,j+1}$ que acopla as colunas, devemos ver seus elementos na linha como o hopping que esta associado a um elemento de uma coluna com cada um dos elementos da coluna seguinte, ou seja, $t_{ji,j'i'}$ é o acoplamento do átomo $j'i'$ com um átomo de outra coluna ji . Para a coluna da matriz, devemos ter acoplamento contrário de todos os elementos de uma coluna com um determinado elemento da coluna anterior, onde podemos

Figura 53 – Representação de uma rede quadrada com n colunas e m camadas. Em que apresentamos termos de acoplamento $t_{ij,i'j'}$ que ligam um sítio com todos os outros de uma mesma coluna e os *hopping* que ligam os átomos em colunas consecutivas.



Fonte: Elaborada pelo autor

representar tudo isso por

$$\mathbf{W}_{(j+1),j} = \begin{pmatrix} t_{(j+1)1,j1} & t_{(j+1)1,j2}^* & t_{(j+1)1,j3} & \cdots & t_{(j+1)1,j(m-1)} & t_{(j+1)1,jm} \\ t_{(j+1)2,j1} & t_{(j+1)2,j2} & t_{(j+1)2,j3} & \cdots & t_{(j+1)2,j(m-1)} & t_{(j+1)2,jm} \\ t_{(j+1)3,j1} & t_{(j+1)3,j2} & t_{(j+1)3,j3} & \cdots & t_{(j+1)3,j(m-1)}^* & t_{(j+1)3,jm}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ t_{(j+1)(m-2),j1} & t_{(j+1)(m-2),j2} & t_{(j+1)(m-2),j3} & \cdots & t_{(j+1)(m-2),j(m-1)} & t_{(j+1)(m-2),jm} \\ t_{(j+1)(m-1),j1} & t_{(j+1)(m-1),j2} & t_{(j+1)(m-1),j3}^* & \cdots & t_{(j+1)(m-1),j(m-1)} & t_{(j+1)(m-1),jm} \\ t_{(j+1)m,j1} & t_{(j+1)m,j2} & t_{(j+1)m,j3} & \cdots & t_{(j+1)m,j(m-1)} & t_{(j+1)m,jm} \end{pmatrix}. \quad (4.234)$$

Considerando o caso particular na subseção anterior, em que permite apenas a

interação entre os primeiros vizinhos, iremos poder reescrever nossas matrizes como

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} 0 & t_{j1,j2}^* & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t_{j1,j2} & 0 & t_{j2,j3}^* & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{j2,j3} & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t_{j(m-1),j(m-2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_{j(m-2),j(m-1)} & 0 & t_{jm,j(m-1)} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_{j(m-1),jm} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.235)$$

e também

$$\mathbf{W}_{(j+1),j} = \begin{pmatrix} t_{(j+1)1,j1} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{(j+1)2,j2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{(j+1)3,j3} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_{(j+1)(m-2),j(m-2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_{(j+1)(m-1),j(m-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & t_{(j+1)m,jm} \end{pmatrix}. \quad (4.236)$$

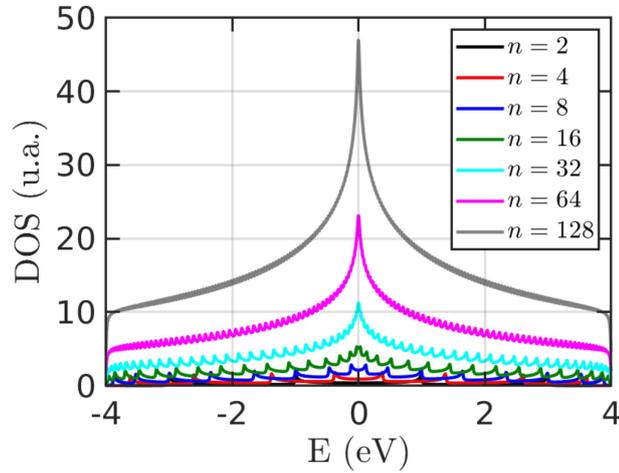
Assim temos todas as matrizes que nos dar o acoplamento dentro de uma rede quadrada qualquer e com isso podemos calcular as propriedades eletrônicas associadas a esse tipo de rede, como o transporte eletrônico e a densidade de estados.

Note que para esse sistema de cadeia quadrada, onde utilizamos o método de decimação, podemos novamente retornar para uma equação análoga a obtida para um sistema de três sítios. Em que basicamente estamos aumentando o número de colunas e linhas do caso para a cadeia escada, como mostrado no gráfico da Fig. 54. Quando analisamos a densidade de estados do sistema total podemos ver que o sistema ganha um pico de densidade no entorno de $E = 0$ de forma cada vez mais intensa, dependendo do número de camadas e colunas, sendo reflexo da contribuição da função de Green de *bulk* que torna-se cada vez mais relevante quando aumentamos o número camadas do sistema n .

4.8.2.4 Exemplo: Grafeno

Observe que tudo que necessitamos saber é a forma como cada átomo de cada coluna ou camada estão sendo ligados. Assim, esse método pode ser aplicado para qualquer estrutura

Figura 54 – Resultado da densidade para o caso da cadeia quadrada, considerando valores de $N = 0$ até $N = 8$, obtidos a partir das funções de Green de superfície $G_1(1, 1)$ e $G_3(1, 1)$ e função de Green de *bulk* $G_2(1, 1)$, utilizando $\eta = 0,01$ e $t = 1$.



Fonte: Elaborada pelo autor

cristalina, como por exemplo as que apresentaremos agora: a estrutura do grafeno ou fosforeno. À luz dessa técnica, iremos agora estudar as propriedades eletrônicas de nanofitas de grafeno com bordas *armchair* e *zigzag*, como ilustrado nas Figs. 55 e 56, respectivamente. A largura da nanofita está relacionada com o número de sítios em uma fatia. Dividiremos as estruturas em n fatias com m sítios cada. Utilizaremos a abordagem de primeiros vizinhos, com valor de energia de ligação de $t = 2.7$ eV.

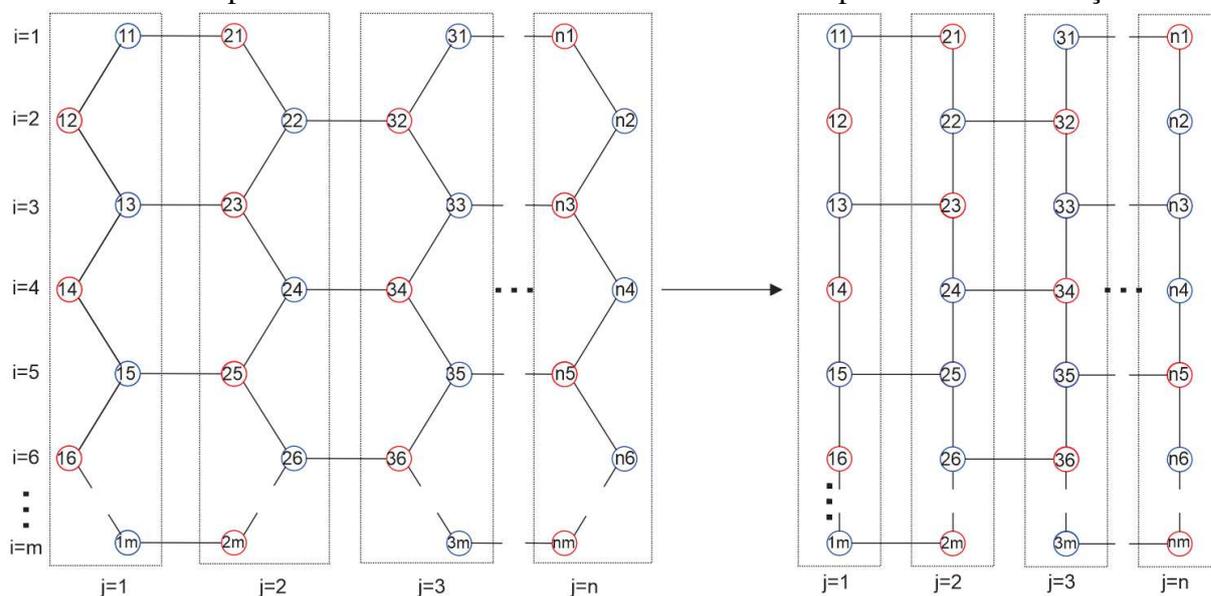
Note, para a estrutura das nanofitas de grafeno com bordas *armchair* (Fig. 55), que todos sítios, exceto os das bordas, em uma determinada coluna possuem duas ligações não-nulas de primeiros vizinhos, de forma análoga ao modelo da rede quadrada de primeiros vizinhos da subseção anterior. Dessa maneira, a matriz \mathbf{V}_j é dada por

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} 0 & t_{j1,j2}^* & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t_{j1,j2} & 0 & t_{j2,j3}^* & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{j2,j3} & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t_{j(m-1),j(m-2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_{j(m-2),j(m-1)} & 0 & t_{jm,j(m-1)} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_{j(m-1),jm} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.237)$$

que possui a mesma forma da Eq. (4.235) para o caso da rede quadrada vista na subseção anterior.

Por outro lado, a matriz $\mathbf{W}_{(j+1),j}$ que relaciona os *hoppings* entre os sítios da coluna j com os sítios da coluna $j + 1$ devem ser levemente diferente da Eq. (4.236) para o caso da

Figura 55 – (a) Representação de nanofita de grafeno com bordas *armchair*. (b) Mapeamento da nanofita de grafeno em rede de tijólos. A direção horizontal é infinita e a direção vertical terá comprimento relacionado com o número de sítios em cada fatia. Cada fatia possui m sítios. As n fatias estão envolvidas no processo de decimação.



Fonte: Elaborada pelo autor

rede quadrada, uma vez que os átomos de uma coluna j tem ligações alternadas com aqueles da coluna $j + 1$. Como exemplo para explicar essa alternância de ligantes, vamos tomar os sítios das colunas $j = 1$ e $j = 2$. Note que o sítio 11 está ligado ao sítio 21, mas o sítio 12 não está ligado com o sítio 22. O sítio 22 possui ligações apenas dentro da própria coluna. Por sua vez, o átomo seguinte 13 da coluna $j = 1$ possui ligação com o átomo 23 da coluna adjacente, enquanto que sítio seguinte 14 não é conectado com nenhum sítio da coluna adjacente dentro do modelo de primeiros vizinhos. Pode-se perceber para esse exemplos das colunas $j = 1$ e $j = 2$ que teremos ligações de sítios entre colunas com rotulações de números ímpares, enquanto que os pares apenas possuem ligação na mesma coluna. Avaliando as conexões entre as diferentes colunas adjacentes, percebe-se que essa situação acontece para ligações entre as colunas $j = 1 \rightarrow j = 2$, $j = 3 \rightarrow j = 4$, $j = 5 \rightarrow j = 6$, e assim sucessivamente para as colunas $j = 2l + 1 \rightarrow j = 2(l + 1)$, com $l = 0, 1, 2, \dots$. Assim, a matrix $\mathbf{W}_{2(j+1),2j+1}$ que relaciona as

conexões entre a coluna $j = 2l + 1$ com a coluna $j = 2(l + 1)$ é dada por

$$\mathbf{W}_{2(j+1),2j+1} = \begin{pmatrix} t_{(j+1)1,j1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t_{(j+1)3,j3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_{(j+1)5,j5} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.238)$$

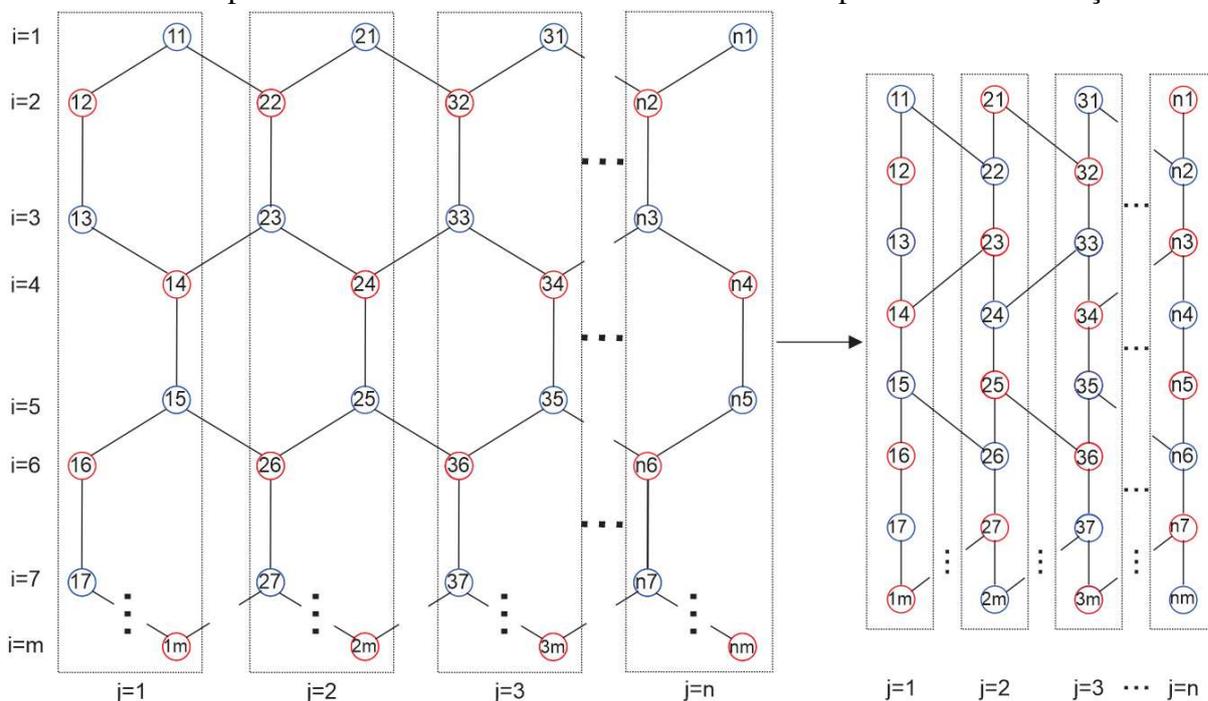
A situação é invertida quando avaliamos as conexões entre as colunas $j = 2(l + 1) \rightarrow j = 2l + 1$, com $l = 0, 1, 2, \dots$. Note isso pela Fig. 55 para as ligações entre as colunas $j = 2$ e $j = 3$, por exemplo. Nessa situação, teremos uma alternância entre não-ligante e ligante, tal que a matrix $\mathbf{W}_{2j+1,2(j+1)}$ que relaciona as conexões entre a coluna $j = 2(l + 1)$ com a coluna $j = 2l + 1$ é dada por

$$\mathbf{W}_{2(j+1),2j+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t_{(j+1)2,j2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t_{(j+1)4,j4} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.239)$$

Como todos os *hoppings* de primeiros vizinhos entre os átomos no grafeno são iguais ao valor t , assim podemos reescrever as Eqs. (4.237), (4.238) e (4.239) tais como

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} 0 & t^* & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & t^* & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t & 0 & t^* \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.240)$$

Figura 56 – (a) Representação de nanofita de grafeno com bordas *zigzag*. (b) Mapeamento da nanofita de grafeno em rede de tijolos. A direção horizontal é infinita e a direção vertical terá comprimento relacionado com o número de sítios em cada fatia. Cada fatia possui m sítios. As n fatias estão envolvidas no processo de decimação.



Fonte: Elaborada pelo autor

$$\mathbf{W}_{\text{even} \leftarrow \text{old}} = \begin{pmatrix} t & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.241)$$

para conexões entre sítios das colunas pares para as ímpares, e

$$\mathbf{W}_{\text{old} \leftarrow \text{even}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.242)$$

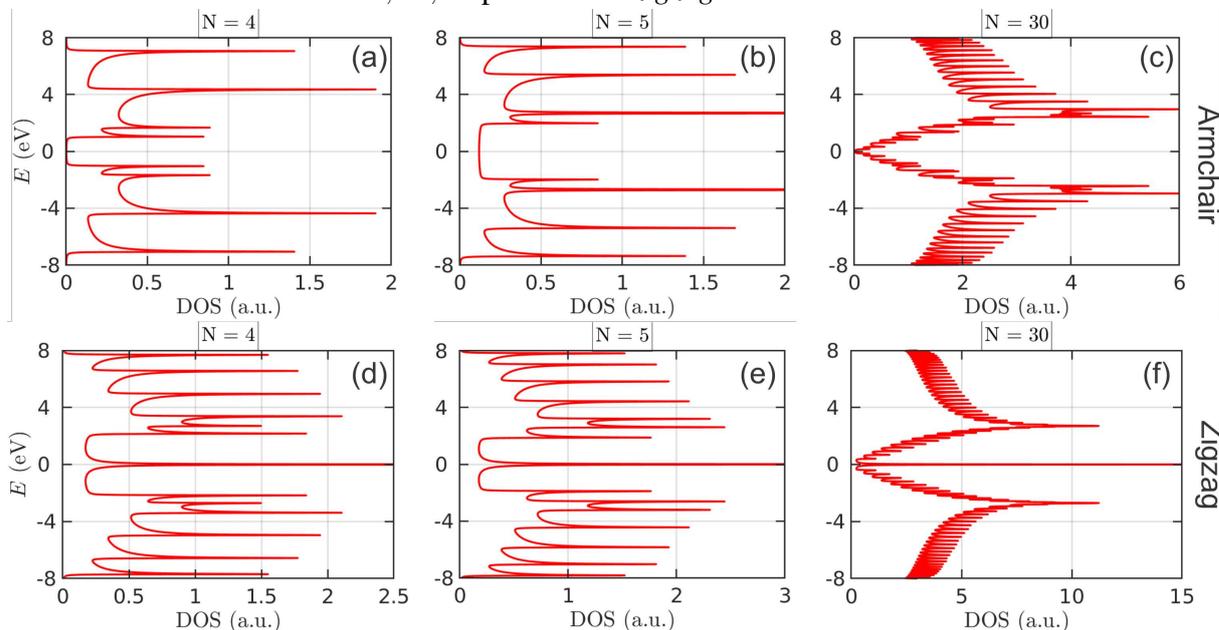
para conexões entre sítios das colunas ímpares para as pares.

Vamos analisar agora a construção das matrizes \mathbf{W} e \mathbf{V} para nanofitas de grafeno com bordas *zigzag*. A Fig. 56(a) representa esquematicamente a rotulação das colunas, sítios em cada coluna, número de colunas e linhas de átomos. Na situação de nanofitas com bordas *zigzag*, a direção que possui simetria de translação é a direção horizontal na figura, enquanto a direção vertical é restrita e com tamanho dependente do número de linhas de átomos, isto é, do número de sítios m em uma coluna j . Na Fig. 56(b) apresentamos o mapeamento da rede da nanofita de grafeno *zigzag* na rede de tijólos. De forma semelhante ao caso *armchair*, todos os sítios em uma determinada coluna, excetos os sítios das bordas, possuem dois primeiros vizinhos dentro da mesma coluna. Dessa maneira, a matriz \mathbf{V}_j , que está relacionada com as conexões entre os sítios de uma mesma coluna, é a mesma para o caso *armchair* dada pela Eq. (4.237) (ou equivalentemente para os valores substituídos de t , na Eq. (4.240)). Entretanto, comparando as Figs. 55 e 56, podemos observar uma diferença nas ligações entre sítios das colunas adjacentes para o caso *armchair* e *zigzag*. Neste último, observa-se ligações não-nulas entre átomos de linhas diferentes. No caso *armchair* tínhamos ligações entre sítios de colunas adjacentes apenas para sítios em uma mesma linha, isto é, o sítio j, i da coluna j se ligava ao sítio $j+1, i$, e nenhuma ligação entre sítios do tipo $\{j, i\} \rightarrow \{j+1, i \pm 1\}$ era observado. No caso *zigzag*, observa-se o contrário, isto é, tem-se apenas ligações do $\{j, i\} \rightarrow \{j+1, i \pm 1\}$. Uma outra diferença na construção da matriz \mathbf{W} do caso *armchair* em comparação ao caso *zigzag* é que no caso *armchair* todas as conexões entre as diferentes colunas são iguais, enquanto que no caso *armchair* foi discutido que se tinha uma alternância entre o caso das conexões entre colunas ímpares \leftarrow pares e pares \leftarrow ímpares. Assim, podemos escrever a matriz $\mathbf{W}_{(j+1),j}$ para o caso *zigzag* tal como

$$\mathbf{W}_{(j+1),j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & \dots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.243)$$

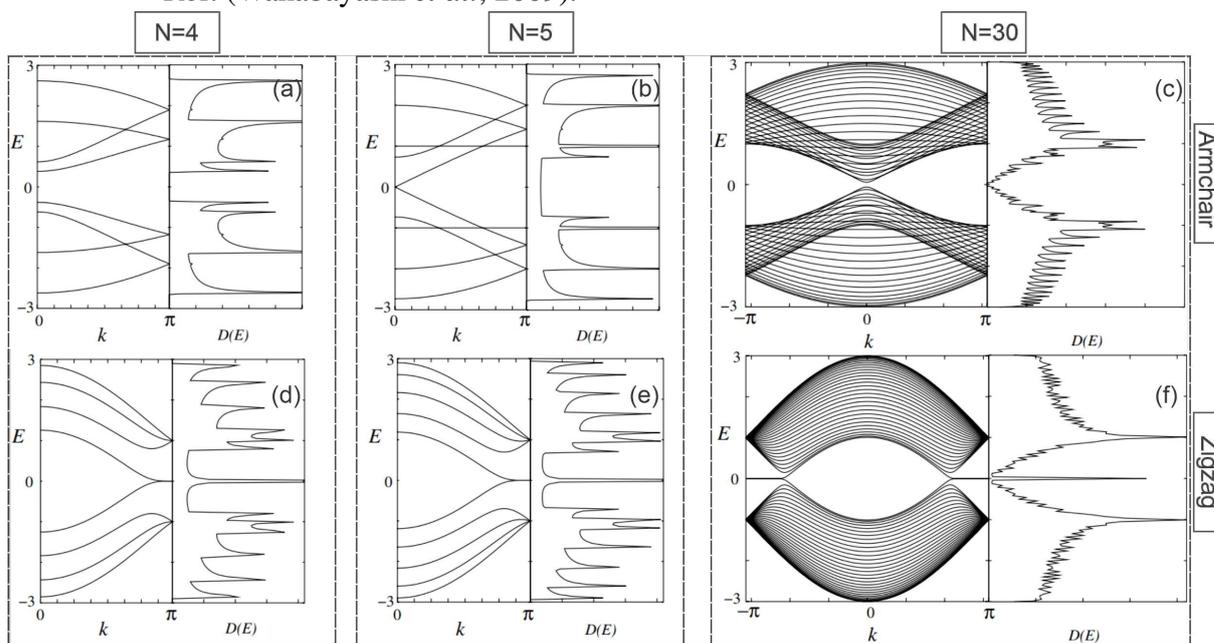
Note pela Eq. (4.243) que ela é uma matriz diagonal em blocos, com blocos de matrizes diagonais 4×4 , com apenas dois elementos não nulos: o elemento (linha, coluna) = 21 e o elemento (linha, coluna) = 44.

Figura 57 – Densidade de estados para nanofitas de grafeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores) com diferentes tamanhos: (a, d) $N = 4$, (b, e) $N = 5$, e (c, f) $N = 30$, tomando $\eta = 0.01$, $t = 2.7$ eV, e $n = 4, 5, 30$ para o caso *armchair* e $n = 8, 10, 60$ para o caso *zigzag*.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 58 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade dos estados $D(E)$ de nanofitas de grafeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores) com diferentes larguras: (a, d) $N = 4$, (b, e) $N = 5$, e (c, f) $N = 30$. Adaptado da Ref. (Wakabayashi *et al.*, 2009).



Fonte: (Wakabayashi *et al.*, 2009)

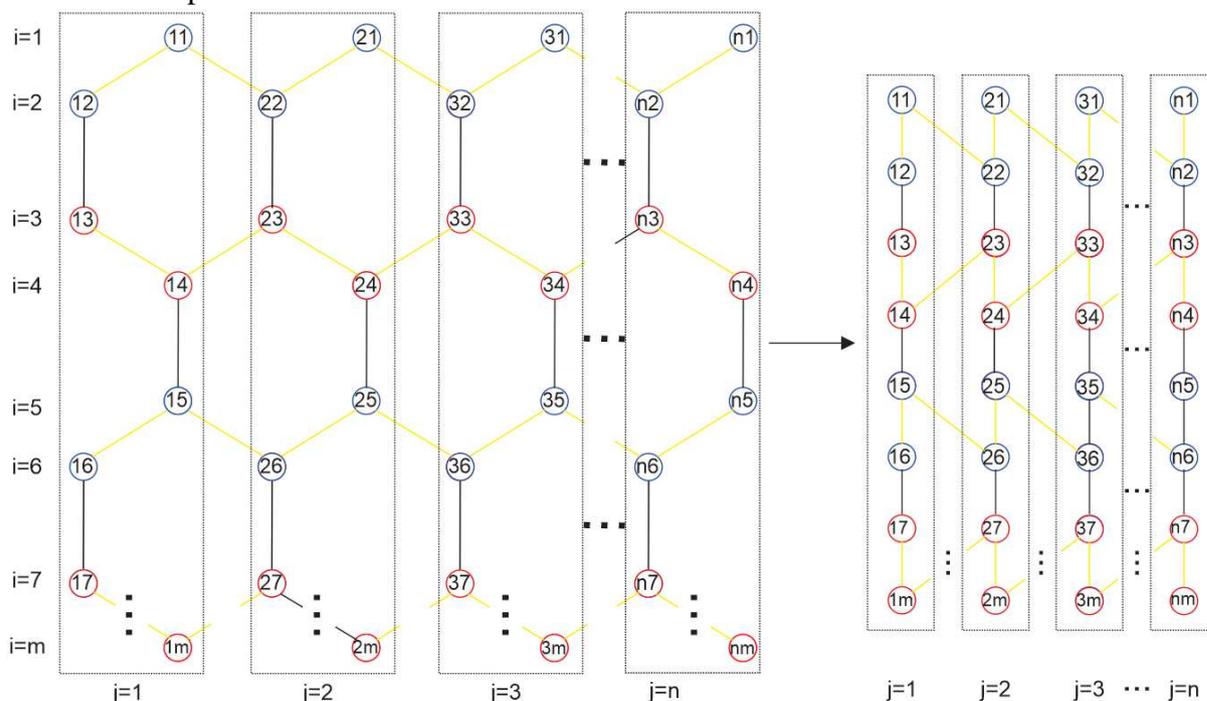
Com as matrizes \mathbf{V} e \mathbf{W} em mãos para os casos das nanofitas de grafeno *armchair* e *zigzag*, implementamo-as computacionalmente utilizando o método da função de Green recursivo com decimação *surface-bulk* discutido anteriormente. Os resultados para a densidade de estados para diferentes larguras de nanofitas estão apresentados na Fig. 57. Painéis superiores (a,b,c) e inferiores (d,e,f) correspondem ao caso de nanofitas com bordas *armchair* e *zigzag*, respectivamente. A principal diferença entre as densidades de estados para os casos *zigzag* e *armchair* é a presença de um pico central na DOS para o caso *zigzag* em decorrência dos estados de bordas. Em tais estados, também chamados de estados de superfície, as funções de onda dos elétrons são localizadas nas bordas da nanofita e correspondem aos estados com energia $E = 0$. Comparando os resultados para os diferentes tamanhos de nanofitas, percebe-se que ao aumentarmos o número de linhas atômicas a densidade de estados obtida para a nanofita cada vez mais se assemelha ao caso de uma folha de grafeno infinita, com dois picos bem pronunciados que são relacionados as *singularidades de van Hove*. (Wakabayashi *et al.*, 2009) A fim de nos certificar da implementação numérica da técnica aqui apresentada para o caso do grafeno, comparamos os nossos resultados das densidades de estados para o mesmo número de linhas com aqueles resultados reportados na Ref. (Wakabayashi *et al.*, 2009), para $N = 4$ (coluna da esquerda), $N = 5$ (coluna do meio), e $N = 30$ (coluna da direita). Tal comparação mostra a perfeita concordância entre os resultados obtidos aqui nessa dissertação. Um ponto importante a ser destacado na comparação dos resultados é que a forma de contagem de linhas para as nanofitas *zigzag* na Ref. (Wakabayashi *et al.*, 2009) é diferente da forma aqui considerada na Fig. 56, no qual uma linha de átomos na Ref. (Wakabayashi *et al.*, 2009) equivale a duas linhas de átomos na nossa representação.

4.8.2.5 Exemplo: Fosforeno

Nesta subseção, iremos apresentar mais outro exemplo da aplicação da técnica da função de Green recursiva através da decimação *surface-bulk* para uma rede bidimensional. Agora consideraremos um material semiconductor anisotrópico em que possuirá diferentes valores de *hopping*. A ideia aqui é aplicar esta técnica para o caso da monocamada de fósforo negro que apresenta uma estrutura cristalina, vista de cima, semelhante a rede favo de mel do grafeno, entretanto ao ser visto lateralmente possui uma forma enrugada na direção *armchair*. Para contornar essa forma cristalina que sai do plano da estrutura, iremos considerar aqui que estamos achatando toda a estrutura para um único plano e que os valores de energia de ligação que

conecta átomos de fósforo em uma mesma subcamada são diferentes daquelas ligações que conectam átomos de subcamadas diferentes. Esse modelo foi proposto na Ref. (Sisakht *et al.*, 2015) para discutir o papel dos diferentes *hoppings* no espectro de energia de nanofitas de fosforeno. Surpreendentemente, tal modelo *tight-binding* simplificado consegue capturar o aspecto anisotrópico das bandas de energia do fosforeno. Em contraste, tal modelo resulta em bandas de energia com simetria elétron-buraco, isto é, as bandas com energias positivas são em módulo iguais as bandas de energia negativas $E_- = -E_+$. Tais *hoppings*, t_1 e t_2 , estão ilustrados na Fig. 5(a) e estrutura de bandas dada na Fig. 5(c) para esse modelo *tight-binding* simplificado com apenas dois *hoppings* distintos, como discutido brevemente no Capítulo 1. Representamos os diferentes *hoppings* com cores (t_1 em amarelo conectando átomos de mesma subcamada e t_2 em preto conectando átomos de subcamadas distintas) diferentes na Fig. 59 e Fig. 60 para nanofitas de fosforeno com bordas *zigzag* e *armchair*, respectivamente.

Figura 59 – (a) Representação de nanofita de fosforeno com bordas *zigzag*. (b) Mapeamento da nanofita de fosforeno em rede de tijólos anisotrópica, devido aos *hoppings* distintos dependendo das ligações. Ligações em amarelo são associadas aos *hoppings* t_1 entre sítios em uma mesma subcamada e em cor preta denotamos os *hoppings* t_2 entre sítios de subcamadas distintas. A largura da nanoestrutura está associada ao número de linhas m de átomos de fósforo. n corresponde o número de fatias utilizadas no processo recursivo de decimação *surface-bulk*. Os átomos vermelhos e azuis representam os átomos de subcamadas distintas.



Fonte: Elaborada pelo autor

Começando pelas nanofitas de fosforeno com bordas *zigzag*. Observe que a estrutura

da Fig. 59 é bastante semelhante a apresentada para o caso do grafeno na Fig. 56, exceto pelos diferentes valores de *hoppings* em algumas ligações. Dessa maneira, a construção das matrizes \mathbf{W} e \mathbf{V} , de uma forma geral, será semelhante ao caso do grafeno. Note pela Fig. 59 que: (i) em uma determinada coluna teremos uma alternância entre os *hoppings* t_1 e t_2 , assim a matriz \mathbf{V} que conecta átomos de uma mesma coluna será dada pela Eq. (4.237) com uma alternância dos *hoppings* nos elementos das diagonais superior e inferior, isto é, com diagonal $[t_1, t_2, t_1, t_2, \dots]^T$; (ii) os sítios das colunas adjacentes são conectados seguindo a mesma linha de raciocínio discutida para o caso da nanofita de grafeno com borda *zigzag* e ilustrada na Fig. 56, exceto pelo fato de que agora o *hopping* envolvido é t_1 . Assim, a matriz \mathbf{W} que conecta os átomos de fatias adjacentes é semelhante a dada pela Eq. (4.243), isto é, diagonal em bloco formada por blocos 4×4 , mas com valores dos elementos de matriz não-nulos sendo t_1 .

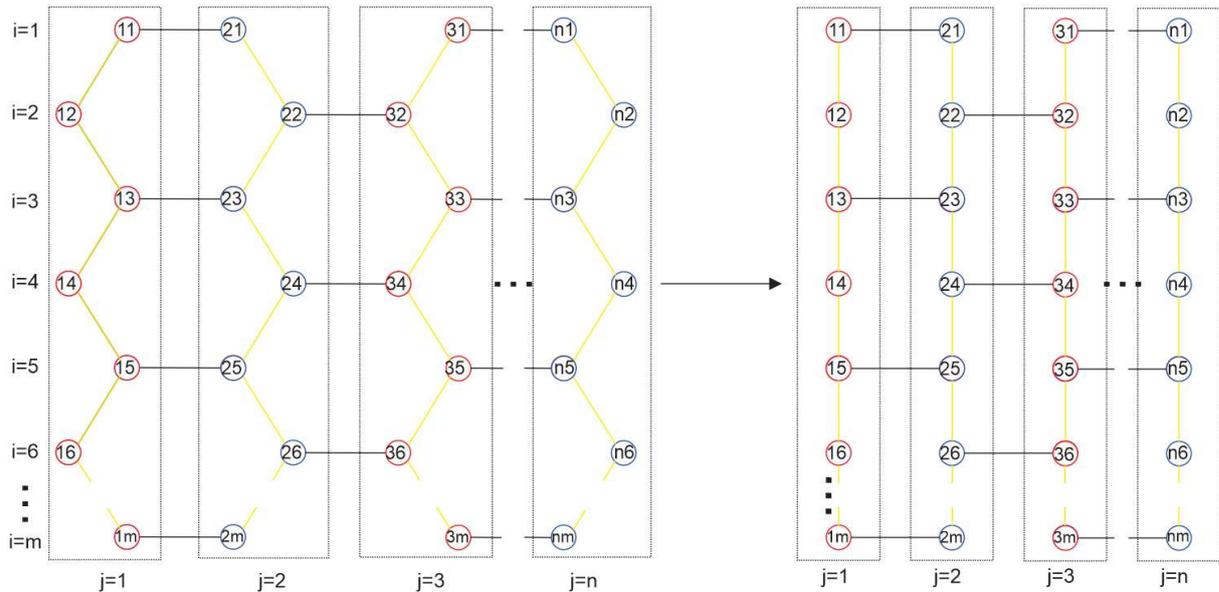
Baseado nos pontos expostos acima, temos para o caso da nanofita de fosforeno com bordas *zigzag*, dentro do modelo *tight-binding* de dois *hoppings*, as seguintes matrizes \mathbf{W} e \mathbf{V} , conectando sítios de fatias adjacentes e sítios da mesma fatia, respectivamente dadas por:

$$\mathbf{W}_{(j+1),j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 & \dots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.244)$$

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} 0 & t_1^* & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2^* & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t_1^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_1 & 0 & t_2^* \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.245)$$

Vamos agora apresentar a construção das matrizes \mathbf{W} e \mathbf{V} para o caso de nanofitas de fosforeno com bordas *armchair*. A orientação da estrutura cristalina e divisão das colunas/fatias

Figura 60 – (a) Representação de nanofita de fosforeno com bordas *armchair*. (b) Mapeamento da nanofita de fosforeno em rede de tijólos anisotrópica, devido aos *hoppings* distintos dependendo das ligações. Ligações em amarelo são associadas aos *hoppings* t_1 entre sítios em uma mesma subcamada e em cor preta denotamos os *hoppings* t_2 entre sítios de subcamadas distintas. A largura da nanoestrutura está associada ao número de linhas m de átomos de fósforo. n corresponde o número de fatias utilizadas no processo recursivo de decimação *surface-bulk*. Os átomos vermelhos e azuis representam os átomos de subcamadas distintas.



Fonte: Elaborada pelo autor

para essa situação está ilustrada na Fig. 60 e é a mesma assumida na Fig. 55 para o caso da nanofita de grafeno *armchair*. Note que todos os átomos de uma determinada coluna/fatia se conectam com dois vizinhos mais próximos, exceto os átomos das bordas, com energia de ligação dada pelo *hopping* t_1 . Dessa maneira, a matriz de acoplamento \mathbf{V}_j correspondente as conexões entre sítios em uma mesma coluna j deve ser dada por uma equação semelhante a Eq. (4.245), diferindo apenas no valor do *hopping*, que agora é t_1 (ligações entre os átomos denotadas pelas linhas em amarelo na Fig. 60), sendo portanto dada por

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} 0 & t_1^* & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_1^* & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & t_1^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_1 & 0 & t_1^* \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & t_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.246)$$

Note pela Fig. 60 que as ligações entre os átomos de colunas adjacentes estão sempre

alternandas em ligadas e não-ligadas entre sítios de uma mesma linha. O mesmo acontece para o caso das nanofitas de grafeno com bordas *armchair* discutido na Fig. 55. A única diferença é pelo valor do *hopping* que agora é o t_2 . Dessa maneira, as matrizes \mathbf{W} conectando os sítios das colunas adjacentes pares para as ímpares e entre sítios das colunas ímpares para as pares são semelhantes as Eqs. (4.241) e (4.242), respectivamente, apenas trocando t por t_2 para o caso do fosforeno. Isto resulta nas seguintes matrizes

$$\mathbf{W}_{\text{even} \leftarrow \text{old}} = \begin{pmatrix} t_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.247)$$

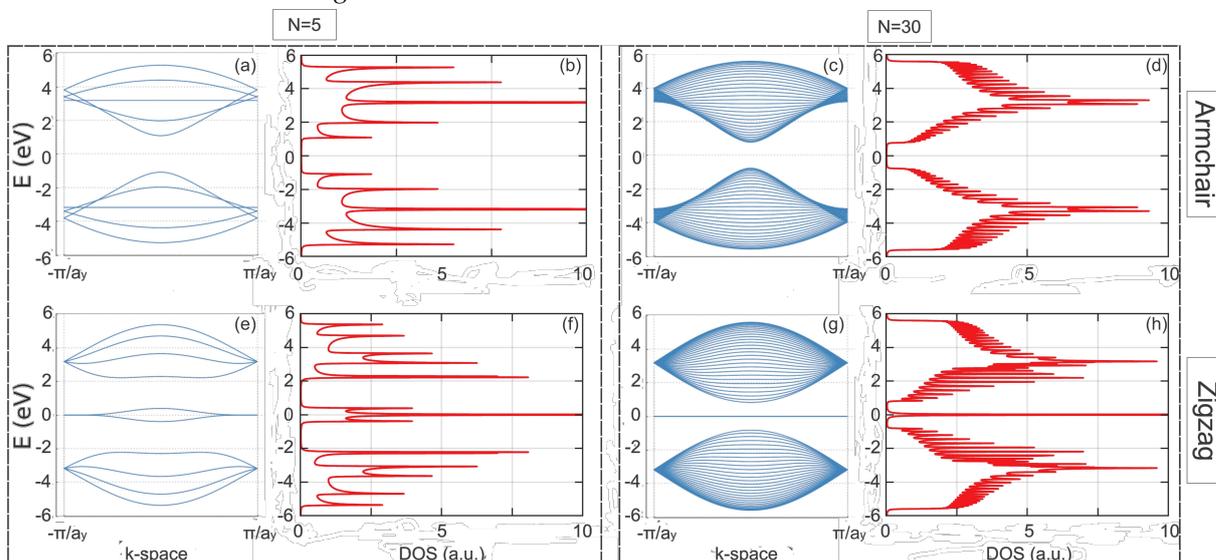
e

$$\mathbf{W}_{\text{old} \leftarrow \text{even}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t_2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & t_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.248)$$

Figura 61 apresenta os resultados das relações de dispersão e densidades de estados para nanofitas de fosforeno com diferentes tipos de bordas e tamanhos. Os resultados das densidades de estados foram obtidos pelo método da função de Green recursiva utilizando a decimação *surface-bulk* com as matrizes \mathbf{V} e \mathbf{W} dadas pelas Eqs. (4.244) e (4.245) para o caso *zigzag* e Eqs. (4.246), (4.247), e (4.248) para o caso *armchair*. Painéis superiores e inferiores na Fig. 61 correspondem aos resultados para as nanofitas com bordas *armchair* e *zigzag*, respectivamente. Colunas à esquerda e à direita correspondem aos resultados para $N = 5$ e $N = 30$, respectivamente. Vale salientar que os resultados obtidos para as relações de dispersão das nanofitas de fosforeno foram encontrados escrevendo código computacional implementado através do pacote *Pybinding* (Moldovan *et al.*, 2017), onde utilizamos o modelo *tight-binding* simplificado com dois *hoppings*, como ilustrado na Fig. 5.

De forma semelhante ao caso das nanofitas de grafeno, as nanofitas de fosforeno com bordas *zigzag* apresentam estados próximos ao zero de energia, que por sua vez correspondem

Figura 61 – Relações de dispersão e densidade dos estados de nanofitas de fosforeno com bordas *armchair* (painéis superiores) e *zigzag* (painéis inferiores), assumindo diferentes larguras: (a, b, e, f) $N = 5$ e (c, d, g, h) $N = 30$. Assumimos $\eta = 0.01$ para o valor do *broadening*.



Fonte: Elaborada pelo autor

aos estados de borda do sistema e, consequentemente, tais estados são responsáveis pelo pico pronunciado na densidade de estados. Nota-se ao aumentar a largura das nanofitas *zigzag* (compare Figs. 61(e, f) e 61(g, h)) que os estados de borda ficam cada vez mais degenerados para qualquer valor de momento k , o que resulta em um pico em $E = 0$ na densidade de estados cada vez mais alto. Os estados de bordas são ausentes nas nanofitas com bordas *armchair*, e assim as densidades de estados apresentam valor nulo na região de *gap*. Duas observações de cunho geral podem ser feitas: (i) pode-se facilmente perceber que o número de picos na densidade de estados está relacionado ao número de estados nas relações de dispersão; (ii) com o aumento do número de linhas de átomos o sistema tende a apresentar uma densidade de estados que se assemelha ao caso do sistema de folha infinita, com dois picos pronunciados em energias mais altas onde as relações de dispersão são altamente degeneradas.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi discutido algumas propriedades sobre transportes mesoscópicos, juntamente com as fórmulas de Landauer-Büttiker, considerando os casos para um, dois, três e quatro terminais, para determinar sua resistência de condutância entre os terminais. Também falamos sobre o método da matriz de transferência e relacionamos com a matriz de espalhamento, onde apresentamos algumas aplicações importantes, tais como junção pn, barreira de potencial linear e um caso geral para uma barreira de potencial qualquer, considerando uma direção qualquer para o potencial com relação a direção cristalográfica do materiais.

Em geral, podemos pontuar alguns resultados importantes utilizando o método da matriz de transferência. Verificamos que o ângulo de incidência do elétron e o ângulo de rotação do potencial apresentam uma grande influência na capacidade de transporte eletrônico do sistema. Isso ocorre basicamente pela introdução de uma massa efetiva dependente da direção do espaço, levando-nos à curvas de energia dadas por elipses e não por círculos, como no caso convencional de gás de elétrons bidimensionais isotrópicos e semicondutores isotrópicos, apresentando um comportamento com maior transporte eletrônico para direções cristalográficas com $\alpha = 0^\circ$ correspondente a direção com a menor massa. Dessa forma quando calculamos o transporte eletrônico em função de k_y para α mais próximos de 0° vimos uma faixa mais considerável de picos de transmissão. Também verificamos o aparecimento mais intenso desses picos quando aumentamos o número de barreiras de potenciais no sistema, gerando uma faixa de transmissão bastante considerável.

Mais adiante, apresentamos os conceitos sobre a função de Green e duas formas de defini-la: uma através do operador de evolução temporal e outra através da média térmica. Ambos são abordagens importantes, mas a forma apresentada para a média térmica busca trazer uma definição mais geral do problema. Através dessas definições apresentamos a equação de movimento para uma cadeia linear e através desse processo pudemos calcular alguns exemplos de cadeia linear, primeiramente para dois sítios, depois para três sítios e para sítios infinitos utilizando o método de decimação. Também apresentamos uma forma analítica para uma cadeia linear infinita e semiinfinita, onde verificamos que a densidade de estados assume uma forma semelhante a um semi-círculo com regiões de estado não ocupados para $|E - \epsilon_0| < 2t$, criando uma densidade de estados limitadas, sendo reflexo da parte real de G_{11} que está decaindo com $1/E$ no limite assintótico. Quando utilizamos o método da decimação pudemos estudar o aparecimento dessa mesma forma ao considerarmos um número muito grande de sítios no

sistema, onde pudemos retomar a forma para um sistema semiinfinito se analisarmos as funções de Green de superfície e retomar o caso infinito ao analisarmos as de *bulk*.

Posteriormente, estendemos o Hamiltoniano da cadeia linear para uma cadeia bidimensional, de forma que aplicamos para o caso da cadeia escada, utilizando o método da decimação. Exploramos a cadeia escada infinita, obtendo, ao analisarmos a densidade de estados de superfície, que esta retoma a forma circular do sistema semiinfinito, entretanto composto por um semicírculo sobre outro semicírculo maior, devido a contribuição das duas cadeias semiinfinitas vistas pelas superfícies, uma vez que a cadeia escada semiinfinita pode ser vista como a composição de duas cadeias infinitas acopladas. O mesmo ocorre para a forma do gráfico para a densidade de *bulk* retirado a partir da densidade local da função de Green central ou de *bulk*, ganhando a forma comum de semi-círculo investido no interior de outro semi-círculo maior investido com as bordas admitindo singularidades semelhantes ao visto para a cadeia linear infinita. Este é entendido como quatro pontos de singularidade, das quais dois vem de uma cadeia infinita e as outras da outra cadeia infinita das duas camadas. Também estendemos o caso da cadeia escada para a rede quadrada aumentando-se o número de linhas de sítios do sistema, ou seja, aumentamos o número de cadeias infinitas acopladas, refletindo diretamente na densidade de estado do sistema. Em seguida, estudamos os casos da rede cristalina do grafeno e fosforeno, que basicamente podem ser vistos como redes de tijólos. Para estes casos, reproduzimos os resultados das densidades de estados já reportados na literatura para nanofitas com bordas *zigzag* e *armchair*, mas agora utilizando o método da decimação.

Como perspectivas, pretendemos: (i) estender a modelagem computacional do método da decimação para obter os coeficientes de transmissão para todas as redes aqui investigadas; (ii) obter os estados ligados para os sistemas de superredes de barreiras de potenciais quadrados e para o caso das barreiras lineares, utilizando o método da matriz transferência, e verificar o papel da anisotropia ao se comparar os resultados anisotrópicos com as situações isotrópicas.

REFERÊNCIAS

AYLING, S.; BRYCE, A.; GONTIJO, I.; MARSH, J.; ROBERTS, J. A comparison of carbon and zinc doping in gaas/algaas lasers bandgap-tuned by impurity-free vacancy disordering. **Semiconductor science and technology**, IOP Publishing, [s.l.], v. 9, n. 11, p. 2149, 1994. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0268-1242/9/11/020/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 32

BIASOTTO, G. **Desenvolvimento de Nanoestrutura e Filmes de ZnO Para Aplicação COMO SENSORES E NANOGERADORES**. [s.l.], p. 21–23, 2015. Disponível em: <https://emineter.wordpress.com/wp-content/uploads/2018/10/oxford-graduate-texts-henrik-bruus-karsten-flensberg-many-body-quantum-theory-in-condensed-matter-physics-oxford-university-press-usa-2004.pdf>. 26

BINNIG, G.; ROHRER, H. Helv. phys. acta. **Scanning tunneling microscopy,” Phys. Acta**, [s.l.], v. 55, p. 726–735, 1982. 26

BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. **Journal for Physics**, [s.l.], v. 555, 1928. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01339455>. Acesso em: 1 nov. 2024. 24

BRAUN, K. Über die stromleitung durch schwefelmetalls. **Annual Review of Physical Chemistry**, [s.l.], v. 556, 1874. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/andp.18752291207>. Acesso em: 1 nov. 2024. 24

BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction**. [S.l.]: OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=v5vhg1tYLC8C>. Acesso em: 18 jul. 2024. ISBN 9780198566335. 136

BUSCH, G. Early history of the physics and chemistry of semiconductors-from doubts to fact in a hundred years. **European Journal of Physics**, IOP Publishing, Zurich, Switzerland, v. 10, n. 4, p. 254, 1989. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/10/4/002/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 23

CARVALHO, A.; WANG, M.; ZHU, X.; RODIN, A. S.; SU, H.; NETO, A. H. C. Phosphorene: from theory to applications. **Nature Reviews Materials**, Nature Publishing Group, [s.l.], v. 1, n. 11, p. 1–16, 2016. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/natrevmats201661>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

CASTELLANOS-GOMEZ, A.; VICARELLI, L.; PRADA, E.; ISLAND, J. O.; NARASIMHA-ACHARYA, K.; BLANTER, S. I.; GROENENDIJK, D. J.; BUSCEMA, M.; STEELE, G. A.; ALVAREZ, J. *et al.* Isolation and characterization of few-layer black phosphorus. **2D Materials**, IOP Publishing, [s.l.], v. 1, n. 2, p. 025001, 2014. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2053-1583/1/2/025001/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 31

CHEN, D.; TANG, L.; LI, J. Graphene-based materials in electrochemistry. **Chemical Society Reviews**, Royal Society of Chemistry, [s.l.], v. 39, n. 8, p. 3157–3180, 2010. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2010/cs/b923596e/unauth>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29, 34

CHEN, G.; LIN, J.; JIANG, H. Effects of electron mass anisotropy on hall factors in 6h-sic. **Applied physics letters**, American Institute of Physics, s.l., v. 68, n. 10, p. 1341–1343, 1996. Disponível em: <https://pubs.aip.org/aip/apl/article-abstract/68/10/1341/532778/Effects-of-electron-mass-anisotropy-on-Hall?redirectedFrom=fulltext>. Acesso em: 1 nov. 2024. 28, 34

CHENG, F.; HE, B. Anisotropic ballistic transport through a potential barrier on monolayer phosphorene. **Chinese Physics Letters**, IOP Publishing, s.l., v. 33, n. 5, p. 057301, 2016. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0256-307X/33/5/057301/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

COSTA, A. L. V. da *et al.* “there is plenty of room at the bottom”(não falta espaço lá em baixo da escala). **Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineração**, ABM-Associação Brasileira de Metalurgia, Materiais e Mineração, [s.l.], v. 13, n. 2, p. 129–129, 2016. Disponível em: <http://www.tmm.periodikos.com.br/article/doi/10.4322/2176-1523.1302>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

DATTA, S. **Electronic transport in mesoscopic systems**. [s.l.]: Cambridge university press, 1997. Disponível em: <https://www.cambridge.org/core/books/electronic-transport-in-mesoscopic-systems/1E55DEF5978AA7B843FF70337C220D8B>. Acesso em: 1 nov. 2024. 12, 14, 32, 38, 46, 56, 108, 123

DAVY, H. Further researches on the magnetic phenomena produced by electricity with some new experiments on the properties of electric ed bodies in their relation to conductivity powers and temperature. **Philosophical Transactions R**, [s.l.], v. 235, 1821. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rstl.1815.0164>. Acesso em: 1 nov. 2024. 23

DUBEY, A.; DAVE, S.; LAKHANI, M.; SHARMA, A. Applications of graphene for communication, electronics and medical fields: A review. In: IEEE. **2016 International Conference on Electrical, Electronics, and Optimization Techniques (ICEEOT)**. [s.l.], 2016. p. 2435–2439. Disponível em: <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/7755131>. Acesso em: 1 nov. 2024. 28

FARADAY, M. On a new law of electric conduction. **Bernard Quaritch**, [s.l.], v. 432, 1833. 23

FERRY, D.; GOODNICK, S. M. **Transport in nanostructures**. [s.l.]: Cambridge university press, 1999. Disponível em: <https://www.cambridge.org/core/books/transport-in-nanostructures/8C5DB68C5B5BA46ADCE9CBFE7163B03A>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

GALEMBECK, F.; COSTA, C. A.; BURGO, T. A.; BERNARDES, J. S.; GOUVEIA, R. F. Microscopia de sondas: uma caixa de ferramentas da nanotecnologia. **Ciência e Cultura**, Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência, [s.l.], v. 65, n. 3, p. 37–43, 2013. Disponível em: http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?pid=S0009-67252013000300013script=sci_arttextlng=pt. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

GEIM, A. K.; MACDONALD, A. H. Graphene: exploring carbon flatland. **Phys. Today**, [s.l.], v. 60, n. 8, p. 35, 2007. Disponível em: <https://pubs.aip.org/physicstoday/article/60/8/35/389527>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29

GONG, P.; HU, C.-Z.; ZHOU, X.; MIAO, L.; WANG, X. Isotropic and anisotropic physical properties of quasicrystals. **The European Physical Journal B-Condensed**

Matter and Complex Systems, Springer, s.l., v. 52, n. 4, p. 477–481, 2006. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1140/epjb/e2006-00323-6>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

GRAY, S. V. a letter to cromwell mortimer, md secr. rs containing several experiments concerning electricity by mr. stephen gray. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, The Royal Society London, [s.l.], v. 37, n. 417, p. 18–44, 1731. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rstl.1731.0005>. Acesso em: 1 nov. 2024. 23

GUGLIOTTI, M. Irving langmuir: o milagre da ciência. **Química Nova**, SciELO Brasil, [s.l.], v. 24, n. 4, p. 568–572, 2001. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/JLGgCzSgr4ghxRxQq4mxZ5c/?format=html>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

HARRISON, P.; VALAVANIS, A. **Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures**. s.l.: [s.n.], 2005. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/0470010827>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

HAUG, H.; JAUHO, A.-P. *et al.* **Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors**. [s.l.]: Springer, 2008. v. 2. Disponível em: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-73564-9>. Acesso em: 1 nov. 2024. 136

HAYDOCK, R. The recursive solution of the schrodinger equation. In: **Solid state physics**. [s.l.]: Elsevier, 1980. v. 35, p. 215–294. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0081194708605056>. Acesso em: 1 nov. 2024. 141

HEIBLUM, M. Doping effects in algaas. **Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena**, American Vacuum Society, [s.l.], v. 3, n. 3, p. 820–822, 1985. Disponível em: <https://pubs.aip.org/avs/jvb/article-abstract/3/3/820/419975/Doping-effects-in-AlGaAsDoping-effects-in-AlGaAs>. Acesso em: 1 nov. 2024. 32

HITTORF, W. Über das elektrische leitungsvermögen des schwefelsilbers und des kupfersulfürs. **Annals of Physics**, [s.l.], v. 84, 1851. 23, 24

IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. **nature**, Nature Publishing Group, [s.l.], v. 354, n. 6348, p. 56–58, 1991. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/354056a0>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

IMRY, Y. **'Physics of mesoscopic systems' in Directions in Condensed Matter Physics**. [s.l.]: World Scientific Press, Singapore, 1986. Disponível em: https://doi.org/10.1142/9789814415309_004. Acesso em: 1 nov. 2024. 46

JOENSEN, P.; FRINDT, R.; MORRISON, S. R. Single-layer mos2. **Materials research bulletin**, Elsevier, [s.l.], v. 21, n. 4, p. 457–461, 1986. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0025540886900115>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

KHAN, A.; RASHID, R.; MURTAZA, G.; ZAHRA, A. Gold nanoparticles: synthesis and applications in drug delivery. **Tropical journal of pharmaceutical research**, [s.l.], v. 13, n. 7, p. 1169–1177, 2014. Disponível em: <https://www.ajol.info/index.php/tjpr/article/view/145974>. Acesso em: 1 nov. 2024. 28

KHANDELWAL, A.; MANI, K.; KARIGERASI, M. H.; LAHIRI, I. Phosphorene—the two-dimensional black phosphorous: Properties, synthesis and applications. **Materials Science and Engineering: B**, Elsevier, [s.l.], v. 221, p. 17–34, 2017. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0921510717300600>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

KRONIG, R. d. L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, The Royal Society London, [s.l.], v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1931.0019>. Acesso em: 1 nov. 2024. 25

KROTO, H. W.; HEATH, J. R.; O'BRIEN, S. C.; CURL, R. F.; SMALLEY, R. E. C 60: buckminsterfullerene. **nature**, Nature Publishing Group, [s.l.], v. 318, n. 6042, p. 162–163, 1985. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/318162a0>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

L, H.; S, W. **Out of the Crystal Maze: Chapters in the History of Solid State Physics**. [s.l.]: Oxford University Press, 1992. v. 556. Disponível em: <https://global.oup.com/academic/product/9780195053296?i=9780195053296>. Acesso em: 1 nov. 2024. 11, 24, 25

LEWENKOPF, C. H.; MUCCILOLO, E. R. The recursive green's function method for graphene. **Journal of Computational Electronics**, Springer, [s.l.], v. 12, n. 2, p. 203–231, 2013. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10825-013-0458-7>. Acesso em: 1 nov. 2024. 146, 148

LI, H.; WANG, L.; LAN, Z.; ZHENG, Y. Generalized transfer matrix theory of electronic transport through a graphene waveguide. **Physical Review B**, APS, [s.l.], v. 79, n. 15, p. 155429, 2009. Disponível em: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.79.155429>. Acesso em: 1 nov. 2024. 101

LI, L.; YU, Y.; YE, G. J.; GE, Q.; OU, X.; WU, H.; FENG, D.; CHEN, X. H.; ZHANG, Y. Black phosphorus field-effect transistors. **Nature nanotechnology**, Nature Publishing Group, [s.l.], v. 9, n. 5, p. 372–377, 2014. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nnano.2014.35>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

LIU, H.; NEAL, A. T.; ZHU, Z.; LUO, Z.; XU, X.; TOMÁNEK, D.; YE, P. D. Phosphorene: an unexplored 2d semiconductor with a high hole mobility. **ACS nano**, ACS Publications, [s.l.], v. 8, n. 4, p. 4033–4041, 2014. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nn501226z>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

LOJEK, B. **History of semiconductor engineering**. [s.l.]: Springer, 2007. Disponível em: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-34258-8>. Acesso em: 1 nov. 2024. 25

LOSOVYJ, Y. B.; MAKINISTIAN, L.; ALBANESI, E. A.; PETUKHOV, A.; LIU, J.; GALIY, P.; DVERIY, O.; DOWBEN, P. A. The anisotropic band structure of layered In₄Se₃ (001). **Journal of applied physics**, American Institute of Physics, EUA, v. 104, n. 8, p. 083713, 2008. Disponível em: <https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/104/8/083713/342869/The-anisotropic-band-structure-of-layered-In4Se3?redirectedFrom=fulltext>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

LUKASIAK, L.; JAKUBOWSKI, A. History of semiconductors. **Journal of Telecommunications and information technology**, [s.l.], p. 3–9, 2010. Disponível em: <https://jtit.pl/jtit/article/view/1015>. Acesso em: 1 nov. 2024. 11, 24, 25

MAK, K. F.; LEE, C.; HONE, J.; SHAN, J.; HEINZ, T. F. Atomically thin mos 2: a new direct-gap semiconductor. **Physical review letters**, APS, [s.l.], v. 105, n. 13, p. 136805, 2010. Disponível em: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.105.136805>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29

MARION, J. B.; THORNTON, S. T. **Classical Dynamics of Particles and Systems–5 a. Ed.** EUA: Saunders College Publishing, 2004. Disponível em: <https://eacpe.org/content/uploads/2016/11/Classical-Dynamics-of-Particles-and-Systems.pdf>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

MARKOŠ, P.; SOUKOULIS, C. Wave propagation. from electrons to photonic crystals and left-handed materials, princeton university press. [s.l.], 2008. Disponível em: <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/9781400835676/html>. Acesso em: 1 nov. 2024. 99

MOLDOVAN, D.; ANĐELKOVIĆ, M.; PEETERS, F. pybinding v0. 9.4: a python package for tight-binding calculations. **Zenodo**, [s.l.], v. 826942, 2017. Disponível em: <https://zenodo.org/records/4010216>. Acesso em: 1 nov. 2024. 173

MOR, G. K.; VARGHESE, O. K.; PAULOSE, M.; SHANKAR, K.; GRIMES, C. A. A review on highly ordered, vertically oriented tio2 nanotube arrays: Fabrication, material properties, and solar energy applications. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, Elsevier, [s.l.], v. 90, n. 14, p. 2011–2075, 2006. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927024806001693>. Acesso em: 1 nov. 2024. 26

MORRISON, C.; MYRONOV, M. Electronic transport anisotropy of 2d carriers in biaxial compressive strained germanium. **Applied Physics Letters**, AIP Publishing LLC, United Kingdom, v. 111, n. 19, p. 192103, 2017. Disponível em: <https://pubs.aip.org/aip/apl/article/111/19/192103/149500>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

NOVOSELOV, K. Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland. **Reviews of modern physics**, APS, United Kingdom, v. 83, n. 3, p. 837, 2011. Disponível em: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.83.837>. Acesso em: 1 nov. 2024. 11, 28

NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, [s.l.], v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. Disponível em: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1102896>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29

ODASHIMA, M. M.; PRADO, B. G.; VERNEK, E. Pedagogical introduction to equilibrium green's functions: condensed-matter examples with numerical implementations. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, [s.l.], v. 39, n. 1, 2017. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/rbef/a/yvDhk5GVrC5fTtmT9JQMFwb/?format=html>. Acesso em: 1 nov. 2024. 135, 136, 137, 143, 148

ORTON, J. **The Story of Semiconductors**. [s.l.]: Oxford University Press, 2004. Disponível em: <https://academic.oup.com/book/11753>. Acesso em: 1 nov. 2024. 24

REZENDE, S. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**. Editora Livraria da Física, 2004. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YNo7KGEfrlYC>. Acesso em: 18 jul. 2024. ISBN 9788588325272. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YNo7KGEfrlYC>. 34

RITTER, K. A.; LYDING, J. W. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons. **Nature materials**, Nature Publishing Group, [s.l.], v. 8, n. 3, p. 235–242, 2009. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nmat2378>. Acesso em: 1 nov. 2024. 27

RYNDYK, D. A. *et al.* Theory of quantum transport at nanoscale. **Springer Series in Solid-State Sciences**, Springer, [s.l.], v. 184, 2016. Disponível em: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-24088-6>. Acesso em: 1 nov. 2024. 146

SANCHO, M. L.; SANCHO, J. L.; SANCHO, J. L.; RUBIO, J. Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface green functions. **Journal of Physics F: Metal Physics**, IOP Publishing, [s.l.], v. 15, n. 4, p. 851, 1985. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4608/15/4/009/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 146, 148

SARKAR, T. K.; MAILLOUX, R. **The History of Wireless**. [s.l.]: Hoboken: Wiley, 2006. v. 556. Disponível em: <https://www.wiley.com/en-br/History+of+Wireless-p-9780471783015>. Acesso em: 1 nov. 2024. 24

SHERKUNOV, Y.; BETOURAS, J. J. Electronic phases in twisted bilayer graphene at magic angles as a result of van hove singularities and interactions. **Physical Review B**, APS, United Kingdom, v. 98, n. 20, p. 205151, 2018. Disponível em: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.98.205151>. Acesso em: 1 nov. 2024. 143

SHIH, P.-H.; WU, S. Magnetic anisotropic energy gap and strain effect in au nanoparticles. **Nanoscale research letters**, SpringerOpen, [s.l.], v. 5, n. 1, p. 25–30, 2010. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11671-009-9438-z>. Acesso em: 1 nov. 2024. 34

SISAKHT, E. T.; ZARE, M. H.; FAZILEH, F. Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: A tight-binding calculation. **Physical Review B**, APS, [s.l.], v. 91, n. 8, p. 085409, 2015. Disponível em: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.91.085409>. Acesso em: 1 nov. 2024. 170

SOUSA, D. J. P. d. Propriedades eletrônicas do fosforeno (tese). Fortaleza, Brasil, 2018. Disponível em: <https://repositorio.ufc.br/handle/riufc/34593>. Acesso em: 1 nov. 2024. 106

STRUTT, O. Zur wellenmechanik des atomgitters. **Annals of Physics**, [s.l.], v. 319, 1928. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19283911006>. Acesso em: 1 nov. 2024. 24

SZAFER, A.; STONE, A. D. Theory of quantum conduction through a constriction. **Physical Review Letters**, Springer, [s.l.], v. 300, 1989. Disponível em:

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.62.300>. Acesso em: 1 nov. 2024. 46

TAHIR, M.; FATIMA, N.; FATIMA, U.; SAGIR, M. A review on the 2d black phosphorus materials for energy applications. **Inorganic Chemistry Communications**, Elsevier, [s.l.], p. 108242, 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1387700320308327>. Acesso em: 1 nov. 2024. 30

TANIGUCHI, N. On the basic concept of nano-technology. **Pabbati et al**, Japon, 1974. Disponível em: <https://www.scribd.com/document/372768443/On-the-Basic-Concept-of-Nano-technology>. 26

TRAN, V.; SOKLASKI, R.; LIANG, Y.; YANG, L. Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus. **Physical Review B**, APS, [s.l.], v. 89, n. 23, p. 235319, 2014. Disponível em: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.89.235319>. Acesso em: 1 nov. 2024. 31

VOLTA, A. Xvi. del modo di render sensibilissima la più debole elettricità sia natural, sia artificiale. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, The Royal Society London, [s.l.], n. 72, p. 237–280, 1782. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rstl.1782.0018>. Acesso em: 1 nov. 2024. 23

WAKABAYASHI, K.; TAKANE, Y.; YAMAMOTO, M.; SIGRIST, M. Electronic transport properties of graphene nanoribbons. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, [s.l.], v. 11, n. 9, p. 095016, 2009. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/11/9/095016/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 17, 168, 169

WEI, D.; KIVIOJA, J. Graphene for energy solutions and its industrialization. **Nanoscale**, Royal Society of Chemistry, [s.l.], v. 5, n. 21, p. 10108–10126, 2013. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/nr/c3nr03312k/unauth>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29

YAKOVLEV, G.; PERVUSHIN, G.; MAEVA, I.; KERIENE, J.; PUDOV, I.; SHAYBADULLINA, A.; BURYANOV, A.; KORZHENKO, A.; SENKOV, S. Modification of construction materials with multi-walled carbon nanotubes. **Procedia engineering**, Elsevier, [s.l.], v. 57, p. 407–413, 2013. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1877705813007868>. Acesso em: 1 nov. 2024. 27

ZARBIN, A. J.; OLIVEIRA, M. M. Carbon nanostructures (nanotubes and graphene): Quo vadis? **Química Nova**, SciELO Brasil, [s.l.], v. 36, n. 10, p. 1533–1539, 2013. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/3JPDgp4ZqLGYyg68grgZ5w/abstract/?lang=en>. Acesso em: 1 nov. 2024. 29

ZHAN, T.; SHI, X.; DAI, Y.; LIU, X.; ZI, J. Transfer matrix method for optics in graphene layers. **Journal of Physics**, IOP Publishing, [s.l.], v. 25, n. 21, p. 215301, 2013. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/25/21/215301/meta>. Acesso em: 1 nov. 2024. 101