



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

MATHEUS PINHEIRO RAMOS

TUNELAMENTO ANISOTRÓPICO EM BARREIRAS MAGNÉTICAS  
EM MULTICAMADAS DE FÓSFORO NEGRO

FORTALEZA  
2019

MATHEUS PINHEIRO RAMOS

TUNELAMENTO ANISOTRÓPICO EM BARREIRAS MAGNÉTICAS EM  
MULTICAMADAS DE FÓSFORO NEGRO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientador: Prof. Andrey Chaves.

FORTALEZA  
2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

R144t Ramos, Matheus Pinheiro.  
Tunelamento anisotrópico em barreiras magnéticas em multicamadas de fósforo negro /  
Matheus Pinheiro Ramos. – 2019.  
67 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa  
de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2019.

Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.

1. Semicondutores anisotrópicos. 2. Fosforeno. 3. Barreiras magnéticas. 4. Propriedades  
de transporte. I. Título.

CDD 530

---

MATHEUS PINHEIRO RAMOS

TUNELAMENTO ANISOTRÓPICO EM BARREIRAS MAGNÉTICAS EM  
MULTICAMADAS DE FÓSFORO NEGRO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: / / .

BANCA EXAMINADORA

---

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

---

Prof. Dr. Andrey Chaves (Coorientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves  
Instituto Tecnológico da Aeronáutica (ITA)

*À minha família.*

## Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, à Deus pelo dom da vida e por todas as minhas conquistas, incluindo mais esta vitória.

Aos meus pais, Marcos Antônio de Oliveira Ramos e Maria Joana Pinheiro, por serem meus alicerces e exemplos de vida, sempre me incentivando à seguir os bons caminhos. Agradeço também pelo apoio constante na vida acadêmica, sem vocês essa conquista não seria possível.

Ao meu irmão, Diego Pinheiro Ramos, por todo o apoio e incentivo. Agradeço também sua esposa, Lucivane Ferreira Aragão, e seu filho (meu sobrinho e afilhado), João Gabriel Ferreira Ramos.

À minha amada, Andressa Barros Nogueira, por todo apoio e incentivo, e sua paciência infinita em mostrar carinho mesmo nos meus momentos de má disposição, isso foi crucial para eu conseguir concluir este trabalho. Agradeço também pela compreensão por todas as vezes que tive que me ausentar para "fazer as contas". Minha gratidão não pode ser expressa em palavras.

Devo agradecer de forma especial ao meu orientador, Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa, por estar sempre disposto a me ajudar em todos os passos de minha vida acadêmica como pós-graduando. Sua ajuda foi de fundamental importância para o meu crescimento e desenvolvimento enquanto estudante/pesquisador. Sem sua cooperação, empenho e dedicação certamente a conclusão deste trabalho não teria sido possível. Deixo aqui os meus mais sinceros agradecimentos.

Ao meu coorientador, Prof. Dr. Andrey Chaves, por inúmeras discussões valiosas (principalmente durante o período que cursei a disciplina de optoeletrônica no mestrado). Seus ensinamentos foram de grande importância para minha formação acadêmica. Muito obrigado.

Ao Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves por além de ter aceitado prontamente a participar da banca, ainda se dispôs a ajudar no desenvolvimento deste trabalho. Sua ajuda foi de fundamental importância e deixo aqui meu sincero agradecimento.

Ao Prof. Dr. João Milton Pereira Junior, por ter aceitado prontamente participar da banca e analisar o trabalho.

Ao Prof. Dr. Nuno Peres, que se dispôs a cooperar com este trabalho através de valiosas discussões. Deixo aqui meu sincero agradecimento.

Ao Colégio 7 de Setembro por me proporcionar um enorme aprendizado na vida docente. Com toda a certeza essa foi (e continuar a ser) uma das experiências profissionais mais enriquecedoras que já tive e deixo aqui o meu sincero agradecimento.

Ao Colégio Santo Inácio, por me proporcionar um valioso aprendizado no segmento ITA/IME.

Ao Colégio Antares, juntamente com o Colégio 7 de Setembro, por me proporcionarem um rico e vasto aprendizado no segmento de seletivas internacionais de física (IPhO, EuPhO, OIbF entre outras). Lecionar para esses alunos foi (e continuar a ser) um dos maiores desafios que tive o prazer de enfrentar.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio financeiro durante o mestrado e a graduação.

Ao Corpo Docente e funcionários do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará.

# Resumo

A obtenção experimental em 2004 da primeira estrutura bidimensional (2D): o grafeno, uma monocamada de átomos de carbono arranjados em uma rede favo-de-mel, despertou um enorme interesse no meio acadêmico em estudar esta e outras possíveis estruturas 2D tais como: siliceno, nitreto de boro, germaneno e uma classe de materiais denominados de dicalcogênios de metais de transição, como o seleneto de nióbio ( $\text{NbSe}_2$ ) e o dissulfeto de molibidênio ( $\text{MoS}_2$ ), por exibirem uma grande variedade de comportamentos, fazendo assim com que sejam candidatos a uma grande quantidade de aplicações industriais. Dentre essas estruturas, o fósforo negro, o qual está pautado este trabalho, apresenta inúmeras propriedades interessantes como, por exemplo, anisotropia na sua estrutura de bandas e possuir um gap direto de energia que varia com o número de camadas, o que lhe torna promissor não apenas na eletrônica mas também na optoeletrônica. O presente trabalho possui o objetivo de estudar problemas de tunelamento em barreiras magnéticas em multicamadas de fósforo negro. Primeiramente obteremos, a partir do modelo tight-binding, o Hamiltoniano que descreve o comportamento dos transportadores de carga. Em seguida, dentro do regime de duas bandas, faremos a aproximação do contínuo que, por sua vez, nos fornece o modelo de massa efetiva do referido sistema. Trabalhando no modelo de massa efetiva, que apesar de ter sido obtido a partir de sucessivas aproximações é considerado um excelente modelo para baixas energias da relação de dispersão, calcularemos os autoestados do Hamiltoniano com quebra de simetria de translação ao longo de uma das direções considerando ou não a presença de um campo magnético uniforme no sistema. Com as funções de onda nas regiões com e sem campo magnético, estudaremos o problema de tunelamento em uma barreira magnética e estenderemos nossa investigação para o caso de uma superrede de barreiras magnéticas através da técnica chamada de matriz transferência. Verificaremos o papel da anisotropia do material nas propriedades de transporte, apresentando os resultados das probabilidades de transmissão e reflexão para diferentes orientações das barreiras magnéticas, para multicamadas de fósforo negro, e para diferentes direções de propagação do elétron na estrutura.

**Palavras-chave:** Semicondutores anisotrópicos, Fosforeno, Barreiras magnéticas, Propriedades de Transporte.

# Abstract

Experimental achievement in 2004 of the first two-dimensional (2D) structure: Graphene, a monolayer of carbon atoms arranged in a honeycomb lattice, aroused enormous interest in the academic world in studying this and other possible 2D structures such as: silicon, boron nitride, germanene and a class of materials called transition metal dicalcogens such as niobium selenide ( $\text{NbSe}_2$ ) and molybdenum disulfide ( $\text{MoS}_2$ ), as they exhibit a wide range of behaviors, thus making them candidates for a large number of industrial applications. Among these structures, the black phosphorus, in which this study is based, has many interesting properties, such as anisotropy in its band structure and a direct energy gap that varies with the number of layers, which makes it promising not only in electronics but also in optoelectronics. The present work aims to study tunneling problems in magnetic barriers in black phosphor multilayers. First we will get, from the tight-binding model, the Hamiltonian that describes the behavior of the charge transporters. Then, within the two-band regime, we will approach the continuum, which in turn provides us with the effective mass model of that system. Working on the effective mass model, which despite being obtained from successive approximations is considered an excellent model for low energies of the dispersion ratio, we will calculate the Hamiltonian self-states with translation symmetry breaking along one of the directions, considering or not the presence of a uniform magnetic field in the system. Considering the wave functions in the regions with and without magnetic field, we will study the problem of tunneling in a magnetic barrier and extend our investigation to the case of a supernet of magnetic barriers through the technique called transfer matrix. We will examine the role of material anisotropy in transport properties, presenting the results of the transmission and reflection probabilities for different magnetic barrier orientations, for black phosphor multilayers, and for different directions of electron propagation in the structure.

**Keywords:** Anisotropic semiconductors, Phosphorene, Magnetic barriers, Transport Properties.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Materiais bidimensionais . . . . .	1
1.2 O elemento químico: fósforo . . . . .	3
1.3 O fósforo negro e o fosforeno . . . . .	3
1.4 Organização do trabalho . . . . .	7
<b>2 Modelo Teórico</b>	<b>8</b>
2.1 O modelo <i>tight-binding</i> para o fosforeno . . . . .	9
2.1.1 Estrutura cristalina . . . . .	9
2.1.2 Composição orbital das bandas de energia . . . . .	10
2.1.3 Hamiltoniano no modelo <i>tight-binding</i> . . . . .	11
2.2 Modelo contínuo . . . . .	19
2.3 Modelo de massa efetiva . . . . .	23
2.4 Massa efetiva para multicamadas . . . . .	26
<b>3 Tunelamento em um sistema anisotrópico</b>	<b>28</b>
3.1 Descrição do modelo . . . . .	28
3.2 Hamiltoniano com a presença de campo magnético . . . . .	30
3.3 Tunelamento em uma barreira magnética . . . . .	33
3.4 Método da matriz de transferência . . . . .	37
3.5 Múltiplas barreiras magnéticas . . . . .	41

<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>44</b>
4.1	Transmissão em função da energia de Fermi e do campo magnético aplicado	44
4.2	Transmissão em função do número de camadas . . . . .	45
4.3	Influência da anisotropia na transmissão . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>48</b>
<b>A</b>	<b>Substituição de Peierls e a liberdade de <i>gauge</i></b>	<b>49</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>51</b>

## Lista de Figuras

1.1	Estrutura <i>honeycomb</i> do grafeno. . . . .	2
1.2	Variedades alotrópicas do fósforo. Da esquerda para a direita, temos o fósforo branco, vermelho, violeta e negro [15]. . . . .	3
1.3	Estrutura cristalina do fósforo negro, em (a) para uma monocamada e em (b) para três camadas empilhadas [18]. . . . .	4
1.4	Em (a) temos a visão superior da rede cristalina do fosforeno com as direções <i>zigzag</i> e <i>armchair</i> indicadas. Em (b) temos a visão lateral da mesma estrutura com os orbitais de valência indicados em amarelo. Por fim, em (c) temos novamente a visão lateral da estrutura, a mesma mostrada em (b), porém agora estão indicados os pares de elétrons restantes em cada átomo de fósforo. . . . .	5
1.5	Estrutura cristalina do fosforeno com as indicações das direções favoráveis ao transporte de elétrons e de calor. . . . .	6
2.1	Estrutura cristalina do fosforeno apresentada em diferentes perspectivas. Em (a) é mostrada uma visão lateral da estrutura enrugada do fosforeno; ainda na mesma figura temos a orientação dos eixos coordenados. Em (b), temos uma visão superior da mesma rede. Nessa figura, também foi destacada, através de um retângulo azul, a célula unitária, assim como as quatro subredes denominadas de A, B, C e D. Em (c) destacam-se as distâncias entre os átomos e em (d) os ângulos de ligação. . . . .	9
2.2	Contribuição dos orbitais $p_x$ (linha azul), $p_y$ (linha verde) e $p_z$ (linha vermelha), no regime de baixas energias, próximas ao nível de Fermi, para as bandas de energia de uma monocamada de fósforo negro. O painel do lado direito mostra a densidade de estados correspondentes. . . . .	10
2.3	Retratação dos parâmetros de <i>hopping</i> em (a) e os respectivos vetores de rede em (b). . . . .	12

2.4	Estrutura de bandas do fosforeno na região próxima ao centro da zona de Brillouin (ponto $\Gamma$ ). . . . .	17
2.5	Esboço da dispersão de baixas energias do fosforeno. O contínuo de estados azuis (vermelhos) representam buracos (elétrons). . . . .	19
2.6	Esboço da dispersão de baixas energias do fosforeno quando dopado com uma impureza tipo N em (a) e uma impureza tipo P em (b). . . . .	20
2.7	Estrutura de bandas do fosforeno no regime de baixas energias. As linhas pretas e contínuas representam a curva obtida via modelo <i>tight-binding</i> , as linhas azuis e tracejadas foram obtidas via modelo contínuo e, por fim, as linhas vermelhas e pontilhadas a estrutura obtida a partir do modelo de massa efetiva. . . . .	25
2.8	As massas efetivas em unidades de massa livre do elétrons ( $m_0$ ) ao longo das direções x (curvas sólidas) e y (curvas tracejadas) para (a) elétrons e (b) buracos, em função do número de camadas. Os símbolos abertos destacam o comportamento da Eq. (2.94) para valores inteiros do número de camadas N [27]. . . . .	26
3.1	Direção dos eixos cristalográficos ( $x$ e $y$ ) e do sistema de coordenadas utilizado ( $x'$ e $y'$ ). A barreira magnética possui interfaces em $y' = 0$ e $y' = L$ . Os termos $\alpha_i$ , $\alpha_r$ e $\alpha_t$ representam os ângulos da velocidade da onda incidente, refletiva e transmitida, respectivamente. . . . .	29
3.2	Em (a) é apresentado o gráfico de B em função de $y'$ para o problema de uma barreira magnética e em (b) o gráfico da componente $x'$ do potencial vetor para o mesmo problema. . . . .	33
3.3	Espalhamento através de um potencial arbitrariamente localizado ( $V(x) = 0$ exceto na região II). . . . .	38
3.4	Esquematização do espalhamento. As ondas planas incidentes, dadas pela Eq. (3.100), são espalhadas na região 2 (região acinzentada onde temos a presença de um campo magnético uniforme). As ondas de saída, localizadas na região 3 e fornecidas na Eq. (3.102), consistem em ondas transmitidas através da região de campo magnética, bem como ondas refletidas. . . . .	40
3.5	Esquema para o problema de múltiplas barreiras magnéticas. As regiões acinzentadas, todas de mesmo comprimento L, representam as regiões de atuação do campo magnético. Além disso, estamos supondo, por simplicidade, que tais regiões estão equiespaçadas do mesmo comprimento L. . . . .	42
4.1	Gráfico da probabilidade de transmissão T em função da energia de Fermi e da intensidade do campo magnético, para $\theta = 0$ (barreira disposta ao longo da direção <i>zigzag</i> ) e duas larguras de barreira: $L = 5$ nm e $L = 10$ nm. . . . .	44

- 4.2 Gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia de Fermi e da intensidade do campo magnético, para  $\theta = \pi/4$  e duas larguras de barreira:  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm. . . . . 45
- 4.3 Em (a) e (b), temos o gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia para diferentes números de camadas ( $N = 1, 2, 3, 4$  e  $5$ ), com  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm, respectivamente. Em (c) e (d), temos o gráfico de  $T$  em função de  $B$  para  $L = 10$  nm e  $E_F = 0,1$  eV e  $E_F = 0,2$  eV, respectivamente. . . . . 46
- 4.4 Os gráficos acima mostram a probabilidade de transmissão  $T$  em função do ângulo  $\theta$  de disposição da barreira e (a) do campo magnético, (b) da energia de Fermi e (c) da largura da barreira. . . . . 47

## Lista de Tabelas

2.1	Valores numéricos dos parâmetros estruturais e dos <i>hoppings</i> para o fosfo- reno. Tais parâmetros foram obtidos através de modelos <i>ab-initio</i> [33]. . . .	14
2.2	Valores numéricos dos parâmetros do modelo contínuo. . . . .	22
2.3	Valores numéricos para as massas efetivas de elétrons e buracos [22]. A constante $m_0$ é a massa de um elétron livre. . . . .	24

Neste capítulo, faremos uma breve introdução sobre o objeto de estudo desse trabalho: o semicondutor bidimensional (2D) conhecido como fosforeno. Abordaremos as principais características e propriedades deste material. Por fim, será apresentado a organização do restante do trabalho.

## 1.1 Materiais bidimensionais

O estudo de novas matérias tem impulsionado o desenvolvimento de tecnologias correlatas à eletrônica. O advento da física do estado sólido<sup>1</sup> nos proporcionou adquirir um conhecimento mais aprofundado, em um nível microscópico, a respeito dos materiais, de tal modo que podemos, atualmente, até mesmo manipulá-los a nossa vontade; a fim de construir, por exemplo, dispositivos eletrônicos com propriedades desejadas.

Atualmente, um dos principais componentes da indústria eletrônica é o silício, sendo a matéria-prima para a fabricação de chips e processadores presentes nos computadores. Os motivos pelos quais o silício é tão usado são simples. Primeiro, trata-se de um semicondutor, o qual permite que controlemos o fluxo de corrente em seu interior. Além disso é quantioso, sendo considerado, depois do oxigênio, como o segundo elemento mais abundante na crosta terrestre (encontrado em areia comum) e ainda apresenta relativa facilidade de purificação para uso eficaz e adequado na construção de dispositivos eletrônicos.

Contudo, em 2004, a obtenção experimental do grafeno abriu novas perspectivas para o segmento eletrônico, fomentando estudos acerca deste e de diversos outros materiais que pudessem apresentar propriedades melhores que as do silício [2]. O grafeno é uma das formas cristalinas do carbono, assim como o diamante, porém formado por uma única camada de átomos de carbono arranjados em uma estrutura *honeycomb* (favo de mel) [3], conforme ilustra a Figura 1.1.

---

<sup>1</sup>Vasta área da física quântica onde se trata da compreensão das propriedades mecânica, térmicas, magnéticas e óticas da matéria sólida [1].

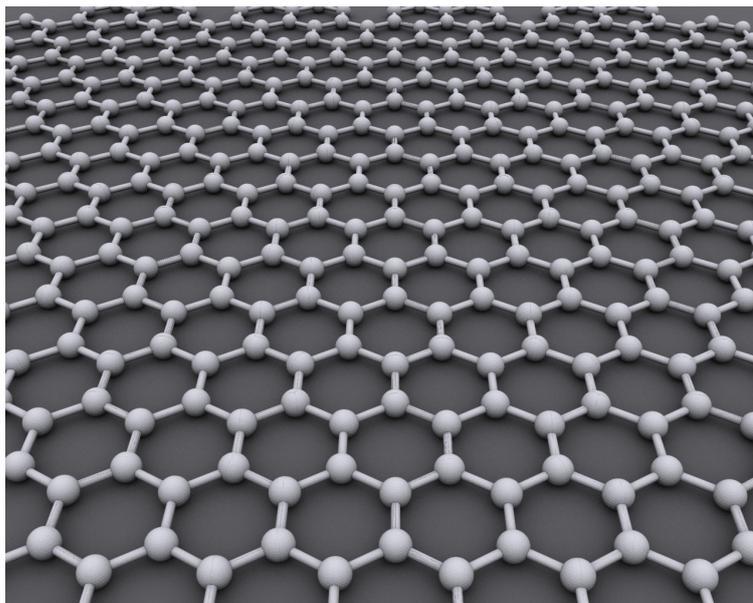


Figura 1.1 – Estrutura *honeycomb* do grafeno.

O grafeno se destaca, principalmente, por ser o primeiro material verdadeiramente bidimensional<sup>2</sup>, podendo ser obtido por meio de diversas técnicas de fabricação sendo a mais simples a esfoliação do grafite. Um outro aspecto que merece destaque no grafeno é a constatação de que, no regime de baixas energias, os elétrons na estrutura se comportam como férmions de Dirac sem massa, isto é, agem como partículas relativísticas sem massa em um espaço-tempo de (1+2) dimensões, sendo duas dimensões espaciais e uma temporal; com a diferença de que, no grafeno, os portadores de carga possuem a velocidade de fermi  $v_F$  (300 vezes menor que a velocidade  $c$  da luz no vácuo) [4, 5]. Férmions de Dirac apresentam comportamentos atípicos, entre eles, o efeito hall quântico anômalo [6], o efeito *Zitterbewegung* (movimento trêmulo do centro de massa de um pacote de onda) [7, 8] e o tunelamento Klein (probabilidade total de ocorrência de transmissão para uma região classicamente proibida quando a incidência é perpendicular à barreira) [9, 10, 11]. Todos comprovados experimentalmente no grafeno.

A obtenção de uma estrutura verdadeiramente bidimensional, que se acreditava ser impossível devido à teoria de Landau e Peierls<sup>3</sup> [12, 13], acarretou no aumento dos estudos acerca de materiais similares. Essa nova classe de materiais 2D possui propriedades físicas esplêndidas tornando-se, portanto, candidatos promissores nas mais diversas aplicações da indústria eletrônica.

O objeto de estudo desse trabalho é o fosforeno, uma estrutura bidimensional obtida

---

<sup>2</sup>Em contraste com estruturas que se comportam como bidimensionais pelo fato de uma das dimensões ser muito reduzida em relação às outras duas, mas com essa dimensão diminuta ainda assim constituída por diversas camadas atômicas.

<sup>3</sup>A referida teoria mostrou que cristais puramente bidimensionais são termodinamicamente instáveis, uma vez que flutuações térmicas levam à deslocamentos atômicos transversais à direção do plano, os quais são da ordem da distância interatômica.

após se esfoliar sua versão *bulk*: o fósforo negro. Tal estrutura apresenta características peculiares, o que a torna um objeto de grande valor acadêmico, como veremos a seguir.

## 1.2 O elemento químico: fósforo

O fósforo, representado pelo símbolo P, é um elemento químico de massa atômica 30,974 u, que integra o grupo 15 da tabela periódica, classificado como ametal e portador da configuração eletrônica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ . Trata-se de um elemento essencial e indispensável na formação da adenosina trifosfato (ATP), na adenosina difosfato (ADP) e ácidos nucleicos, além de fazer parte dos fosfolipídios que dão flexibilidade e integram as membranas celulares. Em animais, o fósforo é essencial no processo de metabolização e possui grande relevância no desenvolvimento e manutenção das estruturas ósseas [14].

Na natureza, o fósforo é encontrado em alguns minerais como a apatita ou em suas formas alotrópicas: fósforo branco, vermelho, azul, violeta e negro (Figura 1.2), sendo um dos elementos que possui maior número de variedades alotrópicas.



Figura 1.2 – Variedades alotrópicas do fósforo. Da esquerda para a direita, temos o fósforo branco, vermelho, violeta e negro [15].

## 1.3 O fósforo negro e o fosforeno

Dentre todas as variedades alotrópicas do fósforo, mencionadas na seção anterior, o fósforo negro é a mais estável sob temperatura e pressão ambiente. Cada camada de sua estrutura cristalina é uma rede ortorrômbica (isto é, possui a forma de cubo deformado ao longo de duas diagonais) com oito átomos na célula unitária [16, 17]. Isolando-se uma única camada de fósforo negro obtemos o fosforeno.

Um dos métodos de síntese do fósforo negro consiste em submeter o fósforo branco e/ou o fósforo vermelho a altas pressões, da ordem de 1,2 GPa para o alótropo branco e 8 GPa para o vermelho. Outra técnica de obtenção, não muito eficaz por produzir amostras pequenas e utilizar elementos tóxicos no processo, é através da dissolução de fósforo branco em uma solução de bismuto, por vinte horas, à uma temperatura na ordem de 400 K seguido por um resfriamento lento até a temperatura ambiente [17]. De posse do fósforo negro, o fosforeno é obtido a partir da esfoliação mecânica. Contudo, devido

às camadas estarem fortemente ligadas, a técnica de esfoliação é bem mais difícil de ser aplicada no fósforo negro do que, por exemplo, no grafite. As amostras obtidas a partir da esfoliação são de boa qualidade e ideais para pesquisas básicas, porém não são adequadas ainda para a produção em larga escala que necessita a indústria eletrônica, isto porque a amostra acaba se degradando devido a oxidação (a qual pode ser evitada envolvendo-a em algum material inerte).

Como pode ser visto na Figura 1.3, o fosforeno possui uma estrutura hexagonal enrugada, o que lhe assegura propriedades mecânicas bastante características como a razão de Poisson negativa ao longo da direção  $z$  quando a compressão, ou tensão, ocorrem ao longo da direção  $x$ , culminando assim no crescimento da amostra na direção transversal quando tensionada na referida direção [17].

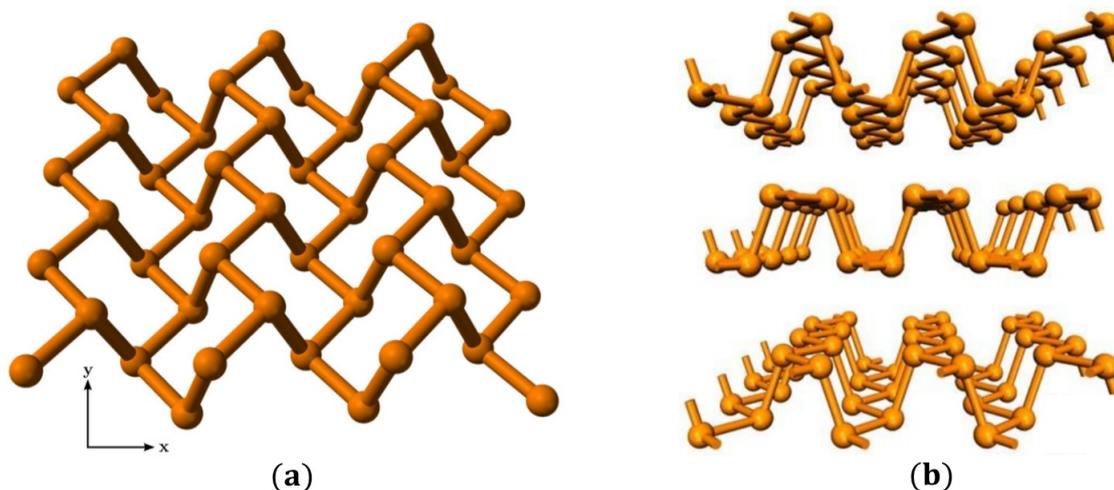


Figura 1.3 – Estrutura cristalina do fósforo negro, em (a) para uma monocamada e em (b) para três camadas empilhadas [18].

Conforme já mencionado, a distribuição eletrônica do fósforo é  $[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$ . Nesse caso, os elétrons do cerce do gás Neônio não participam das ligações químicas, por se tratar de um gás nobre e estarem fortemente ligados ao núcleo. Assim, os dez elétrons em  $1s^2 2s^2 2p^6$  não contribuem para o transporte eletrônico. Já os cinco elétrons presentes na camada de valência,  $3s^2 3p^3$ , são os responsáveis por constituir as ligações que culminam nas formas cristalinas do fósforo. Os elétrons mais externos,  $3p^3$ , junto a um elétron da camada  $3s$  formam uma hibridização do tipo  $sp^3$ . De acordo com a Figura 1.4 (b), três desses orbitais híbridos constituem ligações interplanares, enquanto cada átomo de fósforo possui apenas dois elétrons de valência, conforme ilustra a Figura 1.4 (c).

A estrutura de bandas do fósforo negro exibe um *gap* direto no intervalo de 0,3 eV (*bulk*) até 2,0 eV (monocamada). O fato de o *gap* ser direto para qualquer número de camadas facilita a fabricação de dispositivos eletrônicos estáveis (já que se pode usar mais camadas ao invés de apenas uma); diferente de outros dicalcogenetos de metais de

transição como o disseleneto de tungstênio ( $WS_2$ ) que apresenta um transição de *gap* direto para indireto à medida que aumentamos o número de camadas. Além disto, o vasto intervalo de *gap* possíveis, dependendo do número de camadas, torna o fósforo negro promissor no ramo da optoeletrônica.

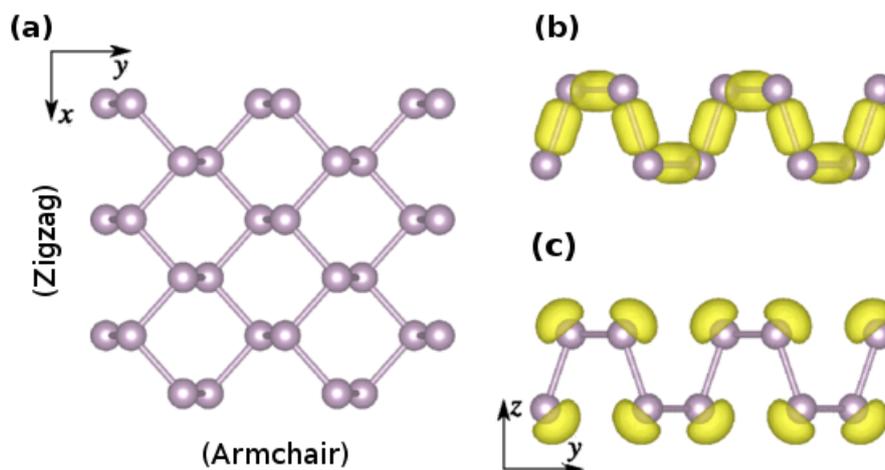


Figura 1.4 – Em (a) temos a visão superior da rede cristalina do fosforeno com as direções *zigzag* e *armchair* indicadas. Em (b) temos a visão lateral da mesma estrutura com os orbitais de valência indicados em amarelo. Por fim, em (c) temos novamente a visão lateral da estrutura, a mesma mostrada em (b), porém agora estão indicados os pares de elétrons restantes em cada átomo de fósforo.

Outro fato interessante é que o fósforo negro é um material anisotrópico. Tal anisotropia faz com que ele apresente diferentes massas efetivas para elétrons e buracos em diferentes direções: sendo maior na direção *zigzag* e menor na *armchair*; o que justifica o transporte eletrônico ser mais favorável ao longo desta última [17]. Para justificar essa afirmação é preciso lembrar que a mobilidade eletrônica dos portadores de carga é definida como o coeficiente de proporcionalidade entre a velocidade de deriva dos portadores e o campo elétrico aplicado (no regime linear). No modelo de Drude<sup>4</sup>, para condução elétrica nos materiais, têm-se

$$\mu = \frac{q\tau}{m_{ef}} \quad (1.1)$$

onde  $\mu$  é a mobilidade elétrica,  $q$  é a carga dos portadores ( $q = -1,6 \cdot 10^{-19}$  para elétrons),  $m_{ef}$  é a massa efetiva dos portadores e  $\tau$  o tempo de espalhamento que é, basicamente, o intervalo de tempo médio decorrido entre dois espalhamentos (colisões) do elétron com

<sup>4</sup>Tal modelo baseia-se na aplicação da teoria cinética aos elétrons num sólido a fim de explicar a condução elétrica no material. Nele, supõe-se que o material contém íons positivos imóveis e um "gás de elétrons" clássicos, que não interagem entre si, e que possuem uma certa densidade, donde o movimento de cada um se encontra amortecido por uma força de fricção produto das colisões dos elétrons com os íons positivos, caracterizada por um tempo de relaxamento.

impurezas no material. Disto decorre também que um alto valor de mobilidade, para uma dada massa efetiva, implica em um alto grau de pureza da amostra.

Constata-se que para que um material seja viável em aplicações tecnológicas, é necessário que haja um padrão na sua qualidade de pureza. Uma das maneiras que dispomos para se verificar a pureza de um material é mediante a confirmação da existência de efeitos quânticos. Por exemplo, a aplicação de um campo magnético em um gás de elétrons bidimensional leva a formação dos chamados níveis de Landau, que já foram observados experimentalmente inúmeras vezes através da presença de oscilações de Shubnikov-de Haas e do efeito Hall quântico. Para que os níveis de Landau sejam observados é necessário que  $\mu B \gg 1$ , onde B representa a intensidade do campo magnético aplicado no material. Tal condição vem do fato de que os níveis de Landau estão associados, semiclassicamente, à presença de órbitas eletrônicas circulares, a qual decorre somente quando o livre caminho médio é muito maior que o raio ciclotrônico. Por esse motivo, tais efeitos são tão facilmente mascarados por desordem na amostra.

Outra consequência da anisotropia é a presença de dicroísmo, isto é, a luz é absorvida em taxas diferentes dependendo da direção de polarização da luz incidente. Ao incidir, por exemplo, um feixe de luz perpendicular à amostra e com polarização ao longo da direção *armchair*, a absorção é maior para feixes com frequências próximas à largura do *gap* de energia da estrutura de bandas [19].

Devido a baixa condutividade térmica e a alta condutividade elétrica, que tanto o fósforo negro quanto o fosforeno apresentam à temperatura ambiente, outro ramo em que este material se apresenta promissor é em aplicações termoelétricas, tais como *coolers* termoelétricos ou geradores. Por conta da anisotropia do material tais características também dependem da direção, para se ter um exemplo a condutividade térmica no fosforeno é maior ao longo da direção *zigzag* [17], conforme ilustra a Figura 1.5.

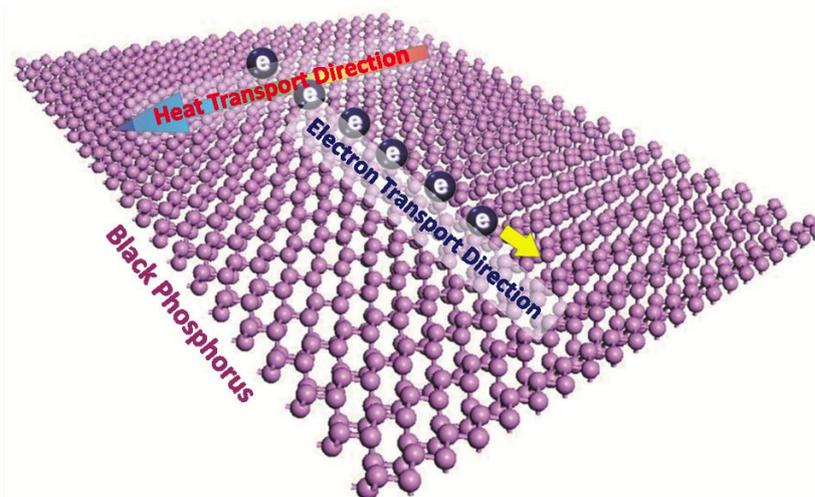


Figura 1.5 – Estrutura cristalina do fosforeno com as indicações das direções favoráveis ao transporte de elétrons e de calor.

As propriedades supracitadas como, por exemplo, a alta mobilidade eletrônica e a mudança no *gap* com o número de camadas, fazem do fosforeno uma estrutura de alto interesse acadêmico e, portanto, tema central deste trabalho.

## 1.4 Organização do trabalho

O restante do trabalho está organizado como se segue:

No Capítulo 2, será apresentado o modelo teórico a ser utilizado no trabalho. Obteremos inicialmente, a partir do modelo *tight-binding*, o Hamiltoniano que descreve a física no fosforeno. Em seguida, dentro do regime de duas bandas, desenvolveremos o modelo contínuo e, logo após, o modelo de massa efetiva para o fosforeno.

No Capítulo 3, partindo do modelo de massa efetiva, descrito no capítulo anterior, calcularemos os autoestados do Hamiltoniano com quebra de simetria de translação ao longo de uma das direções considerando ou não a presença de um campo magnético uniforme no sistema. Logo após, estudaremos o problema de tunelamento em uma barreira magnética e estenderemos o para o caso de uma superrede de barreiras magnéticas através da técnica chamada de matriz de transferência.

No Capítulo 4, investigaremos o papel da anisotropia do material nas propriedades de transporte, apresentado os resultados das probabilidades de transmissão e reflexão para diferentes orientações das barreiras magnéticas para multicamadas de fósforo negro e para diferentes direções de propagação do elétron na estrutura.

Por fim, no Capítulo 5, apresentaremos uma síntese do trabalho e algumas perspectivas.

## Modelo Teórico

Nanoestruturas bidimensionais como o grafeno e fosforeno são geralmente estudadas através de um número limitado de modelos, tais como: o  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , o *tight-binding* e outros métodos baseados em cálculos *ab-initio*<sup>1</sup>. Os métodos baseados no modelo  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  possuem a vantagem de gerarem resultados rapidamente e sem um grande aparato computacional; entretanto, a simplicidade do modelo faz com que o grau de exatidão dos resultados obtidos possa não ser conveniente para o análise de certas propriedades eletrônicas do material. Por outro lado, métodos baseados em cálculos *ab-initio* são bastante eficazes na descrição de propriedades eletrônicas mas, em contrapartida, é necessário dispor de muito tempo e de grande poder computacional para a extração de tais resultados; o que acarreta, dependendo da situação, em desvantagem. Por fim, um intermediário entre os dois modelos supracitados é o *tight-binding*, pelo o qual obtemos uma descrição adequada das propriedades eletrônicas de uma determinada estrutura em um tempo hábil e sem a exigência de grande poder computacional.

O estudo realizado neste trabalho foi desenvolvido mediante o uso do modelo *tight-binding*. Tal escolha se deu, principalmente, por causa do êxito demonstrado por esse modelo na descrição das propriedades eletrônicas e de transporte eletrônico de nanoestruturas de fosforeno, como pode ser consultado em publicações recentes [27, 29, 30, 31].

Neste capítulo, temos como objetivo apresentar o modelo *tight-binding*<sup>2</sup>. Obteremos, a partir de tal modelo, o Hamiltoniano que descreve o comportamento de elétrons e buracos no fosforeno; o qual resulta em um espectro de energia com quatro bandas. Logo após, dentro do regime de duas bandas, faremos uma aproximação em torno do ponto  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = 0$ ), conhecida como aproximação do contínuo (ou aproximação de longos comprimentos de

---

<sup>1</sup>Os cálculos *ab-initio* são métodos da química computacional baseados em diferentes métodos de química quântica que possuem como intento resolver a equação de Schrödinger associada a um Hamiltoniano molecular. Basicamente, chamamos de métodos *ab-initio* os métodos que não possuem em suas equações parâmetros empíricos; sendo derivados diretamente de princípios teóricos, não incluindo, portanto, dados experimentais. É importante ressaltar que isto não implica que tais métodos nos forneçam a solução exata da equação; as soluções obtidas são sempre respostas aproximadas da mecânica quântica.

<sup>2</sup>Para maiores detalhes sobre o modelo *tight-binding* no formalismo de segunda quantização consulte a referência [32].

onda), onde tomaremos apenas termos quadráticos em  $\mathbf{k}$ . Por fim, utilizando o modelo de duas bandas, descreveremos o modelo de massa efetiva para o fosforeno.

## 2.1 O modelo *tight-binding* para o fosforeno

Para uma descrição adequada das propriedades eletrônicas do fosforeno a partir do modelo *tight-binding* precisamos, inicialmente, conhecer sua estrutura cristalina, os parâmetros estruturais e a composição orbital das bandas de energia.

### 2.1.1 Estrutura cristalina

No capítulo 1, foi feita uma breve discussão acerca da estrutura cristalina do fosforeno. Entretanto, nesta subseção, descreveremos de maneira aprofundada as principais características que devem ser levadas em consideração no desenvolvimento do modelo *tight-binding* para o fosforeno.

A Figura 2.1 apresenta a estrutura cristalina do fosforeno vista a partir de duas perspectivas diferentes. Na Figura 2.1 (a), vemos a estrutura enrugada do fosforeno de uma perspectiva lateral, de perfil. Já a Figura 2.1 (b) mostra a mesma estrutura vista de cima, isto é, ao longo da direção  $z$ . É interessante notar, ainda na Figura 2.1 (b), o aspecto "favo de mel" que a rede apresenta; semelhante a do grafeno, o que justifica o fato de o fosforeno ser tratado como um material bidimensional cuja a célula unitária, destacada na figura por um retângulo azul, contém quatro sítios atômicos (ou subredes do cristal) denominados de A, B, C e D.

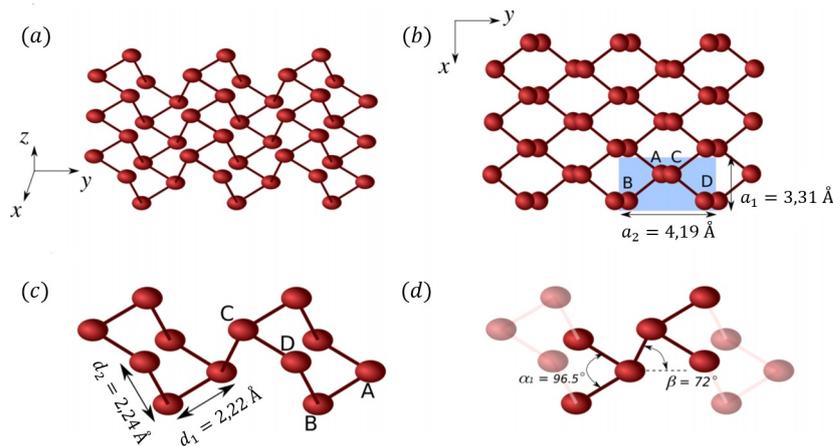


Figura 2.1 – Estrutura cristalina do fosforeno apresentada em diferentes perspectivas. Em (a) é mostrada uma visão lateral da estrutura enrugada do fosforeno; ainda na mesma figura temos a orientação dos eixos coordenados. Em (b), temos uma visão superior da mesma rede. Nessa figura, também foi destacada, através de um retângulo azul, a célula unitária, assim como as quatro subredes denominadas de A, B, C e D. Em (c) destacam-se as distâncias entre os átomos e em (d) os ângulos de ligação.

As Figuras 2.1 (c) e (d) destacam os parâmetros estruturais de interesse: as distâncias entre os átomos e os ângulos de ligação, respectivamente. É importante ressaltar que os eixos coordenados e o parâmetros expressos nessas figuras serão os utilizados nos cálculos que seguirão.

### 2.1.2 Composição orbital das bandas de energia

A Figura 2.2 ilustra a composição orbital das bandas de energia do fosforeno no regime de baixas energias, próximas a energia de Fermi, onde vale o modelo *tight-binding*. Ainda na mesma figura, mais a direita, é apresentado também a densidade de estados correspondentes. Observa-se que próximo aos pontos X e Y os orbitais  $p_x$  (linha azul) e  $p_y$  (linha verde) possuem contribuições relevantes, entretanto, à medida que nos aproximamos do ponto  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = 0$ ), apenas o orbital  $p_z$  (linha vermelha) possui uma contribuição significativa<sup>3</sup>.

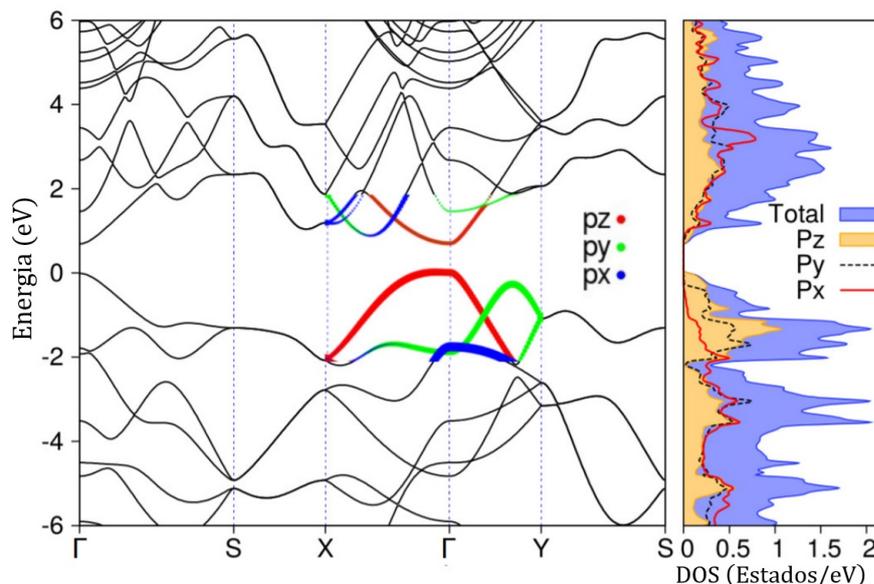


Figura 2.2 – Contribuição dos orbitais  $p_x$  (linha azul),  $p_y$  (linha verde) e  $p_z$  (linha vermelha), no regime de baixas energias, próximas ao nível de Fermi, para as bandas de energia de uma monocamada de fósforo negro. O painel do lado direito mostra a densidade de estados correspondentes.

Neste trabalho, assim como em outros existentes na literatura, a descrição das propriedades eletrônicas do fosforeno no regime de energias próximas ao nível de Fermi será feita a partir do modelo contínuo, o qual vale nas proximidades do ponto  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = 0$ ). Por-

<sup>3</sup>É importante salientar que embora a contribuição do orbital  $p_z$  seja a mais significativa próximo ao ponto  $\Gamma$ , as contribuições dos outros dois orbitais,  $p_x$  e  $p_y$ , não podem ser completamente desprezadas se quisermos uma descrição mais precisa. Contudo, por simplicidade, tomaremos apenas as contribuições do orbital  $p_z$  ao longo deste trabalho. Tal aproximação têm se mostrado bastante eficaz na descrição das propriedades eletrônicas do fosforeno no regime de baixas energias [27, 29, 30, 31].

tanto, na descrição do modelo *tight-binding* que começaremos a desenvolver na próxima subseção, consideraremos apenas as contribuições dos orbitais  $p_z$  (que são as de maior relevância próximas a este ponto); similar ao que é feito na descrição do grafeno.

### 2.1.3 Hamiltoniano no modelo *tight-binding*

O Hamiltoniano *tight-binding*, no formalismo de segunda quantização, que descreve o comportamento de elétrons e buracos em uma monocamada de fósforo negro (fosforeno) é definido como uma soma sobre todos os sítios da rede cristalina, na forma

$$\mathcal{H}_{TB} = \sum_i \varepsilon_i n_i + \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} t_{ij} \alpha_i^\dagger \alpha_j, \quad (2.1)$$

onde  $\varepsilon_i$  é a energia do elétron no  $i$ -ésimo sítio (também denominada energia *on-site*),  $n_i = \alpha_i^\dagger \alpha_i$  é o operador número (isto é, nos fornece o número de elétrons no  $i$ -ésimo sítio) e  $t_{ij}$  é o acoplamento entre os sítios  $i$  e  $j$  (ou parâmetro de *hopping*). Os operadores  $\alpha_i^\dagger$  e  $\alpha_i$  são, na respectiva ordem, os operadores de criação e aniquilação e tem como função criar e aniquilar estados associados a um elétron no  $i$ -ésimo sítio<sup>4</sup>.

O primeiro termo da Eq. (2.1), que é a parte do Hamiltoniano correspondente às energias em cada sítio atômico (energias *on-site*) da estrutura cristalina, pode ser reescrito, convenientemente, na forma

$$\mathcal{H}_{OS} \equiv \sum_i \varepsilon_i n_i = \sum_i \left( \varepsilon_A a_i^\dagger a_i + \varepsilon_B b_i^\dagger b_i + \varepsilon_C c_i^\dagger c_i + \varepsilon_D d_i^\dagger d_i \right), \quad (2.2)$$

onde  $\varepsilon_A$ ,  $\varepsilon_B$ ,  $\varepsilon_C$  e  $\varepsilon_D$  são, respectivamente, as energias *on-site* das subredes A, B, C e D, ilustradas na figura 2.1 (b). Já os operadores de criação e aniquilação ( $\alpha_i^\dagger$  e  $\alpha_i$ ), foram renomeados de acordo com a subrede em que atuam<sup>5</sup>. Desse modo, o operador  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) cria (aniquila) um elétron na subrede A, enquanto o operador  $b_i^\dagger$  ( $b_i$ ) cria (aniquila) um elétron na subrede B; o mesmo valendo para os operadores  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) e  $d_i^\dagger$  ( $d_i$ ) que atuam nas subredes C e D, respectivamente.

Para uma descrição apropriada do sistema iremos considerar o modelo de cinco *hoppings*<sup>6</sup> ( $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$ ,  $t_4$  e  $t_5$ ), indicados na Figura 2.3. Os *hoppings*  $t_1$  e  $t_3$  são os parâmetros

<sup>4</sup>Certamente, nenhuma partícula é criada ou aniquilada no sistema físico, isto se trata apenas de uma interpretação para a ocupação de uma partícula em um dado estado.

<sup>5</sup>Neste trabalho, adotaremos a seguinte convenção:  $\alpha_i^\dagger$  ( $\alpha_i$ ) refere-se ao operador de criação (aniquilação) de um elétron no  $i$ -ésimo sítio atômico de uma subrede arbitrária, enquanto  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ),  $b_i^\dagger$  ( $b_i$ ),  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) e  $d_i^\dagger$  ( $d_i$ ) referem-se aos operador de criação (aniquilação), também no  $i$ -ésimo sítio atômico, somente das subredes aos quais estão associados.

<sup>6</sup>Certas referências, consulte por exemplo [27], realizam essa descrição utilizando um modelo com um número maior de *hoppings*, entretanto, para os propositos desse trabalho, o modelo de cinco *hoppings* será suficiente. Ambos os modelos fornecem resultados qualitativos semelhantes, sendo a diferença entre eles, basicamente, a maior precisão nos valores dos parâmetros de rede quando o modelo com um maior número de *hoppings* é considerado.

de acoplamento dos sítios A e B, enquanto  $t_2$  e  $t_5$  estão associados aos sítios A e C, e  $t_4$  aos sítios A e D. Além disso, vale salientar que  $t_1$  e  $t_2$  são *hoppings* de primeiros vizinhos, o parâmetro  $t_4$  de segundos vizinhos e, por fim,  $t_3$  e  $t_5$  *hoppings* de terceiros vizinhos.

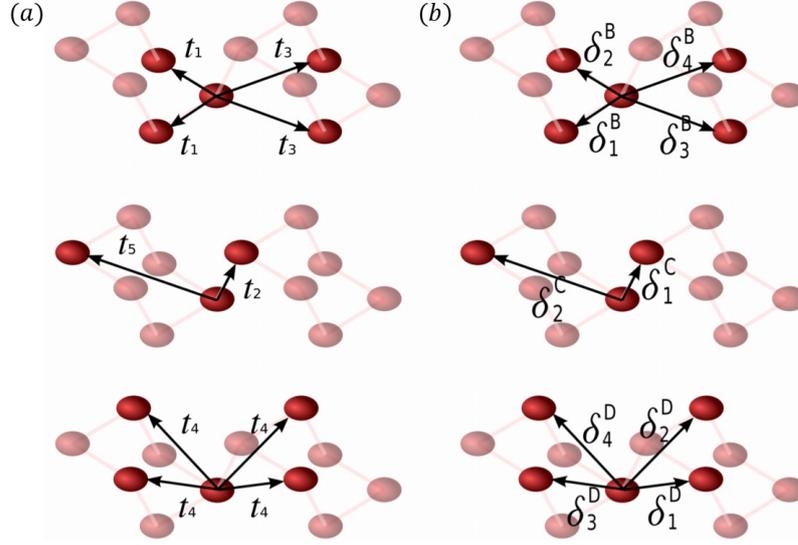


Figura 2.3 – Retratação dos parâmetros de *hopping* em (a) e os respectivos vetores de rede em (b).

Desse modo, as somatórias que surgem na Eq. (2.1) serão realizadas levando em conta apenas os *hoppings* citados acima. Além disso, tal equação pode ser reescrita, de modo mais favorável, na forma

$$\mathcal{H}_{\text{TB}} = \mathcal{H}_{\text{OS}} + \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \mathcal{H}_{ij} \quad (2.3)$$

com  $i, j = A, B, C$  e  $D$ . Os termos  $\mathcal{H}_{ij}$  são tais que para  $i = A$  e  $j = B, C$  e  $D$ , por exemplo, têm-se

$$\mathcal{H}_{\text{AB}} = \sum_{m,n} t_1 a_m^\dagger b_n + \sum_{m',n'} t_3 a_{m'}^\dagger b_{n'}, \quad (2.4)$$

$$\mathcal{H}_{\text{AC}} = \sum_{m,n} t_2 a_m^\dagger c_n + \sum_{m',n'} t_5 a_{m'}^\dagger c_{n'}, \quad (2.5)$$

$$\mathcal{H}_{\text{AD}} = \sum_{m,n} t_4 a_m^\dagger d_n. \quad (2.6)$$

O termo  $\mathcal{H}_{\text{AB}}$  foi escrito desse modo pois estamos considerando que um elétron aniquilado no sítio B possa ser criado no sítio A onde, nesta transição, estão associados os parâmetros  $t_1$  e  $t_3$ . Já  $\mathcal{H}_{\text{AC}}$ , de modo semelhante, foi concebido com a ideia de que um elétron destruído no sítio C possa ser criado no sítio A e a esta transição estão associados os *hoppings*  $t_2$  e  $t_5$ ; idem para um elétron aniquilado no sítio D, que pode ser criado no sítio A através de  $t_4$ .

Com o intento de obter a relação de dispersão do fosforeno desenvolveremos os termos:  $\mathcal{H}_{\text{AB}}$ ,  $\mathcal{H}_{\text{AC}}$  e  $\mathcal{H}_{\text{AD}}$  no espaço de Fourier. Para isso, definimos as transformadas de Fourier

para os operadores de aniquilação e criação na forma

$$\alpha_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \alpha_{\mathbf{k}}, \quad (2.7)$$

$$\alpha_m^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (2.8)$$

onde  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$  e  $\alpha_m(\alpha_m^\dagger) = a_m(a_m^\dagger), b_m(b_m^\dagger), c_m(c_m^\dagger)$  e  $d_m(d_m^\dagger)$ . De antemão já assumimos, por simplicidade, que  $N = N_A = N_B = N_C = N_D$ , com  $N_j$  sendo o número de sítios da subrede  $j = A, B, C$  e  $D$ . Assim, aplicando as transformadas de Fourier supracitadas nas Eq. (2.4), (2.5) e (2.6), obtemos

$$\mathcal{H}_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( t_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \right) + \frac{1}{N} \sum_{m',n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( t_3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m'}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \right), \quad (2.9)$$

$$\mathcal{H}_{AC} = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( t_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right) + \frac{1}{N} \sum_{m',n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( t_5 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m'}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}} a_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right), \quad (2.10)$$

$$\mathcal{H}_{AD} = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( t_4 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n} a_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}'} \right). \quad (2.11)$$

Entranto, é costume definir:  $\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n = \boldsymbol{\delta}_l^s$ , com  $\boldsymbol{\delta}_l^s$  sendo os vetores de rede da subrede A, isto é, vetores que ligam a subrede A, mediante o parâmetro estrutural  $\boldsymbol{\delta}_l$ , com  $l = 1, 2, 3$  e  $4$ , ao sítio atômico da subrede  $s$ , com  $s = B, C$  e  $D$ . Tais vetores são obtidos através da geometria da rede cristalina, mostrada na Figura 2.3, e possuem componentes no plano  $xy$  dadas por

$$\boldsymbol{\delta}_1^B = d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} - d_1 \cos(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.12)$$

$$\boldsymbol{\delta}_2^B = -d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} - d_1 \cos(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.13)$$

$$\boldsymbol{\delta}_3^B = d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} + [d_1 \cos(\alpha_1/2) + 2d_2 \cos(\beta)] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.14)$$

$$\boldsymbol{\delta}_4^B = -d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} + [d_1 \cos(\alpha_1/2) + 2d_2 \cos(\beta)] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.15)$$

$$\boldsymbol{\delta}_1^C = d_2 \cos(\beta) \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.16)$$

$$\boldsymbol{\delta}_2^C = [-2d_1 \cos(\alpha_1/2) - d_2 \cos(\beta)] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.17)$$

$$\boldsymbol{\delta}_1^D = d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} + [d_1 \cos(\alpha_1/2) + d_2 \cos \beta] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.18)$$

$$\boldsymbol{\delta}_2^D = -d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} + [d_1 \cos(\alpha_1/2) + d_2 \cos \beta] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.19)$$

$$\boldsymbol{\delta}_3^D = d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} - [d_1 \cos(\alpha_1/2) + d_2 \cos \beta] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.20)$$

$$\boldsymbol{\delta}_4^D = -d_1 \sin(\alpha_1/2) \hat{\mathbf{x}} - [d_1 \cos(\alpha_1/2) + d_2 \cos \beta] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.21)$$

onde  $d_1$  é a distância entre as subredes A e B e/ou entre as subredes C e D, conforme ilustra a Figura 2.1 (c). Já  $d_2$  é a distância entre as subredes A e C e/ou entre as subredes B e D. Os valores numéricos dos parâmetros supracitados foram obtidos via modelos *ab-initio* e estão expressos na Tabela 2.1 [33].

Tabela 2.1: Valores numéricos dos parâmetros estruturais e dos *hoppings* para o fosforeno. Tais parâmetros foram obtidos através de modelos *ab-initio* [33].

Parâmetros de rede	<i>Hoppings</i>
$d_1 = 2,22 \text{ \AA}$	$t_1 = -1,220 \text{ eV}$
$d_2 = 2,24 \text{ \AA}$	$t_2 = -3,665 \text{ eV}$
$\alpha_1 = 96,5^\circ$	$t_3 = -0,205 \text{ eV}$
$\alpha_2 = 101,9^\circ$	$t_4 = -0,105 \text{ eV}$
$\beta = 72^\circ$	$t_5 = -0,055 \text{ eV}$

Utilizando a expressão,

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_i^s} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n}, \quad (2.22)$$

nas Eq. (2.9), (2.10) e (2.11) obtemos, respectivamente,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB} = & \frac{1}{N} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_1 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^B} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^B} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \\ & + \frac{1}{N} \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_3 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_{n'}} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3^B} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_4^B} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AC} = & \frac{1}{N} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_2 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^C} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \\ & + \frac{1}{N} \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_5 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_{n'}} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^C} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

e

$$\mathcal{H}_{AD} = \frac{1}{N} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_4 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_4^D} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}'}, \quad (2.25)$$

donde, usando a relação:

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (2.26)$$

vem,

$$\mathcal{H}_{AB} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{H}_{AC} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}, \quad (2.28)$$

$$\mathcal{H}_{AD} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}, \quad (2.29)$$

onde os fatores  $\mathcal{U}_{Aj}(\mathbf{k})$ , com  $j = B, C$  e  $D$ , são dados por

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) &= \left[ t_1 \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^B} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^B} \right) + t_3 \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3^B} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_4^B} \right) \right] \\ &= 2t_1 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \exp \left[ -ik_y d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] + \\ &+ 2t_3 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \exp \left[ ik_y \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right] \right],\end{aligned}\quad (2.30)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) &= \left[ t_2 \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^C} \right) + t_5 \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^C} \right) \right] \\ &= t_2 \exp \left[ ik_y d_2 \cos(\beta) \right] + t_5 \exp \left\{ -ik_y \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right] \right\},\end{aligned}\quad (2.31)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) &= t_4 \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3^D} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_4^D} \right) \\ &= 4t_4 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \cos \left\{ k_y \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right] \right\}.\end{aligned}\quad (2.32)$$

Já a Eq. (2.2), após a transformada de Fourier nos operadores de criação e aniquilação, torna-se

$$\mathcal{H}_{OS} = \epsilon_A \sum_k a_k^\dagger a_k + \epsilon_B \sum_k b_k^\dagger b_k + \epsilon_C \sum_k c_k^\dagger c_k + \epsilon_D \sum_k d_k^\dagger d_k. \quad (2.33)$$

Os termos restantes, com origem nas outras subredes,  $\mathcal{H}_{ij}$  do Hamiltoniano, Eq. (2.3), podem ser obtidos mediante o uso das simetrias da rede, conforme faremos posteriormente. Assim, o Hamiltoniano total pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{TB} &= \sum_k \left( \epsilon_A a_k^\dagger + \mathcal{U}_{BA}(\mathbf{k}) b_k^\dagger + \mathcal{U}_{CA}(\mathbf{k}) c_k^\dagger + \mathcal{U}_{DA}(\mathbf{k}) d_k^\dagger \right) a_k + \\ &\sum_k \left( \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) a_k^\dagger + \epsilon_B b_k^\dagger + \mathcal{U}_{CB}(\mathbf{k}) c_k^\dagger + \mathcal{U}_{DB}(\mathbf{k}) d_k^\dagger \right) b_k + \\ &\sum_k \left( \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) a_k^\dagger + \mathcal{U}_{BC}(\mathbf{k}) b_k^\dagger + \epsilon_C c_k^\dagger + \mathcal{U}_{DC}(\mathbf{k}) d_k^\dagger \right) c_k + \\ &\sum_k \left( \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) a_k^\dagger + \mathcal{U}_{BD}(\mathbf{k}) b_k^\dagger + \mathcal{U}_{CD}(\mathbf{k}) c_k^\dagger + \epsilon_D d_k^\dagger \right) d_k.\end{aligned}\quad (2.34)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo, dada por  $\mathcal{H}_{TB} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ , assume a forma

$$\sum_k \mathcal{H}_k |\Psi_k\rangle = \sum_k E(\mathbf{k}) |\Psi_k\rangle, \quad (2.35)$$

onde definimos

$$\mathcal{H}_{TB} = \sum_k \mathcal{H}_k, \quad (2.36)$$

no qual  $\mathcal{H}_k$  é o termo da somatória acima para um dado valor de  $\mathbf{k}$ . Já o vetor de estado no espaço dos momentos é obtido mediante o uso do operador criação juntamente com vetor de onda  $\mathbf{k}$  partindo do estado de vácuo em um sítio da rede cristalina, isto é

$$|\Psi_k\rangle = (\phi_A a_{\mathbf{k}}^\dagger + \phi_B b_{\mathbf{k}}^\dagger + \phi_C c_{\mathbf{k}}^\dagger + \phi_D d_{\mathbf{k}}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.37)$$

onde  $|0\rangle$  é o estado de vácuo do espaço de Fock e as funções  $\phi_A$ ,  $\phi_B$ ,  $\phi_C$  e  $\phi_D$  representam, respectivamente, as amplitudes de probabilidade de um elétron, com vetor de onda  $\mathbf{k}$ , ser encontrado em algum dos sítios das subredes A, B, C e D.

Aplicando as Eq. (2.34) e (2.37) na Eq. (2.35) obtemos, para um dado  $k$ , as relações:

$$\epsilon_A \phi_A + \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) \phi_B + \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) \phi_D + \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) \phi_C = E_k \phi_A, \quad (2.38)$$

$$\mathcal{U}_{BA}(\mathbf{k}) \phi_A + \epsilon_B \phi_B + \mathcal{U}_{BD}(\mathbf{k}) \phi_D + \mathcal{U}_{BC}(\mathbf{k}) \phi_C = E_k \phi_B, \quad (2.39)$$

$$\mathcal{U}_{DA}(\mathbf{k}) \phi_A + \mathcal{U}_{DB}(\mathbf{k}) \phi_B + \epsilon_D \phi_D + \mathcal{U}_{DC}(\mathbf{k}) \phi_C = E_k \phi_D, \quad (2.40)$$

$$\mathcal{U}_{CA}(\mathbf{k}) \phi_A + \mathcal{U}_{CB}(\mathbf{k}) \phi_B + \mathcal{U}_{CD}(\mathbf{k}) \phi_D + \epsilon_C \phi_C = E_k \phi_C, \quad (2.41)$$

onde usamos o fato de um estado de vácuo satisfazer:  $\alpha_k |0\rangle = 0$ , e as relações de anti-comutação para férmions (elétrons), dadas por:  $\{\alpha_k, \gamma_k\} = 0$  e  $\{\alpha_k, \gamma_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\gamma}$ , com  $\alpha, \gamma = a, b, c$  e  $d$ .

Escrevendo as Eq. (2.38), (2.39), (2.40) e (2.41) em forma matricial:  $\mathcal{H}_k \Psi_k = E_k \Psi_k$ , obtemos

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \epsilon_A & \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{BA}(\mathbf{k}) & \epsilon_B & \mathcal{U}_{BD}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{BC}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{DA}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{DB}(\mathbf{k}) & \epsilon_D & \mathcal{U}_{DC}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{CA}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{CB}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{CD}(\mathbf{k}) & \epsilon_C \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi_k = \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \\ \phi_D \\ \phi_C \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Entretanto, observando a Figura 2.1 (b), vemos que existe uma equivalência entre os sítios A e D, e também entre os sítios B e C. Tais simetrias na rede cristalina do fosforeno nos permitem determinar os parâmetros  $\mathcal{U}_{ij}(\mathbf{k})$ , com  $i \neq j$  e  $i \neq A$ , em termos dos já conhecidos  $\mathcal{U}_{Aj}(\mathbf{k})$ , com  $j = B, C$  e  $D$ , dados pelas expressões (2.30), (2.31) e (2.32), mediante as seguintes trocas:  $C \rightarrow B$  e  $D \rightarrow A$ . Assim, temos as seguintes relações:  $\mathcal{U}_{BD}(\mathbf{k}) = \mathcal{U}_{CA}(\mathbf{k})$ ,  $\mathcal{U}_{DC}(\mathbf{k}) = \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k})$  e  $\mathcal{U}_{BC}(\mathbf{k}) = \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k})$ .

Adicionalmente, da definição de  $\mathcal{H}_{ij}$  decorre que  $\mathcal{U}_{ij} = \mathcal{U}_{ji}^*$ , para  $i, j = A, B, C$  e  $D$ . Logo, a matriz  $\mathcal{H}_k$  expressa na Eq. (2.42) pode ser reescrita na forma

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \epsilon_A & \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k})^* & \epsilon_B & \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k})^* & \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) & \epsilon_D & \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) \\ \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k})^* & \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) & \mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k})^* & \epsilon_C \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

O fato de termos separado a rede cristalina do fosforeno em quatro subredes (A, B, C e D) faz com que a célula unitária tenha quatro átomos. Disto, decorre um modelo de quatro bandas: duas de baixa energia (próximas ao nível de Fermi) e duas de alta energia. Tais bandas estão expressas na Figura 2.4, onde cada curva corresponde a uma dessas referidas bandas.

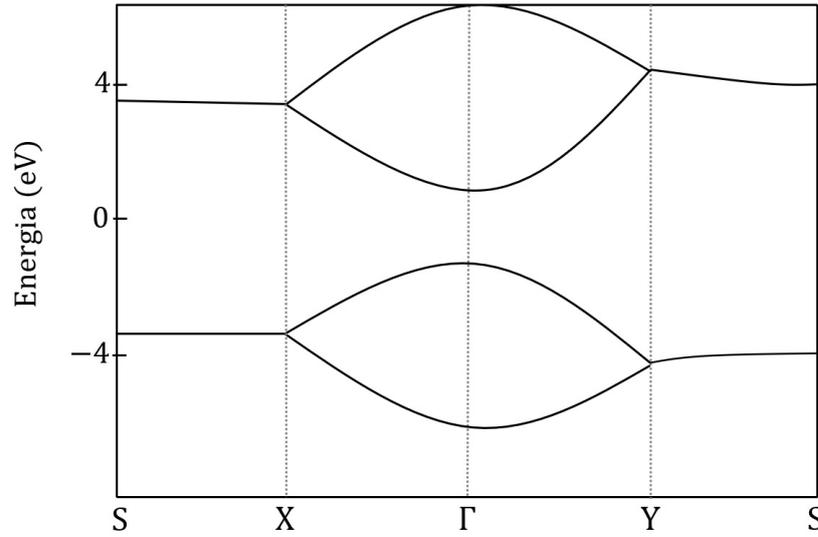


Figura 2.4 – Estrutura de bandas do fosforeno na região próxima ao centro da zona de Brillouin (ponto  $\Gamma$ ).

Considerando, na Eq. (2.43),  $\epsilon_A = \epsilon_B = \epsilon_C = \epsilon_D = \epsilon$ , ficamos com<sup>7</sup>

$$\begin{pmatrix} \epsilon & \mathcal{U}_{AB} & \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AC} \\ \mathcal{U}_{AB}^* & \epsilon & \mathcal{U}_{AC}^* & \mathcal{U}_{AD} \\ \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AC} & \epsilon & \mathcal{U}_{AB} \\ \mathcal{U}_{AC}^* & \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB}^* & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \\ \phi_D \\ \phi_C \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \\ \phi_D \\ \phi_C \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

de onde podemos explorar a equivalência dos sítios A e D, e dos sítios B e C, de modo a obter um modelo reduzido de duas bandas. Em termos matemáticos, reduziremos a matriz quadrada de quarta ordem, Eq. (2.44), em duas matrizes quadradas de segunda ordem. Para isso, faremos uso da seguinte transformação unitária:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

onde  $\mathbf{1}$  é a matriz identidade quadrada. Através da transformação  $U$ , o novo Hamiltoniano fica escrito na forma

$$U^\dagger \mathcal{H}_k U = \begin{pmatrix} \epsilon + \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} + \mathcal{U}_{AC} & 0 & 0 \\ \mathcal{U}_{AB}^* + \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon + \mathcal{U}_{AD} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} - \mathcal{U}_{AC} \\ 0 & 0 & \mathcal{U}_{AB}^* - \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

enquanto as novas autofunções são dadas por

$$U \Psi_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_A + \phi_D \\ \phi_B + \phi_C \\ \phi_A - \phi_D \\ \phi_B - \phi_C \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

<sup>7</sup>Note que essa suposição é plausível, uma vez que todos os átomos que constituem a célula unitária são átomos de fósforo.

onde, por conveniência, definiremos

$$\Psi_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_A + \phi_D \\ \phi_B + \phi_C \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

$$\Psi_k^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_A - \phi_D \\ \phi_B - \phi_C \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Desse modo, através da transformação unitária  $U$ , a Eq. (2.44) toma a forma

$$\begin{pmatrix} \epsilon + \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} + \mathcal{U}_{AC} & 0 & 0 \\ \mathcal{U}_{AB}^* + \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon + \mathcal{U}_{AD} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} - \mathcal{U}_{AC} \\ 0 & 0 & \mathcal{U}_{AB}^* - \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A + \phi_D \\ \phi_B + \phi_C \\ \phi_A - \phi_D \\ \phi_B - \phi_C \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_A + \phi_D \\ \phi_B + \phi_C \\ \phi_A - \phi_D \\ \phi_B - \phi_C \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

A matriz superior, que surge na Eq. (2.50), dada por

$$\mathcal{H}_{\text{superior}} = \begin{pmatrix} \epsilon + \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} + \mathcal{U}_{AC} \\ \mathcal{U}_{AB}^* + \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon + \mathcal{U}_{AD} \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

está relacionada com as energias mais baixas, ou seja, as duas bandas próximas do *gap*, Figura 2.4. Além disto, a esse Hamiltoniano corresponde a autofunção  $\Psi_k^+$ , definida na Eq. (2.48). Os autovalores, ou seja, as energias, podem ser calculadas através do determinante (equação de autovalores):

$$\begin{vmatrix} \epsilon + \mathcal{U}_{AD} - E & \mathcal{U}_{AB} + \mathcal{U}_{AC} \\ \mathcal{U}_{AB}^* + \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon + \mathcal{U}_{AD} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.52)$$

o que nos fornece a seguinte relação de dispersão

$$E_{\pm}^{\text{superior}}(\mathbf{k}) = \epsilon + \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) \pm |\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) + \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k})|. \quad (2.53)$$

Por outro lado, a matriz inferior, que surge também da Eq. (2.50), dada por

$$\mathcal{H}_{\text{inferior}} = \begin{pmatrix} \epsilon - \mathcal{U}_{AD} & \mathcal{U}_{AB} - \mathcal{U}_{AC} \\ \mathcal{U}_{AB}^* - \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

está associada as energias mais altas, ou seja, as duas bandas mais distantes do *gap*. A autofunção desse Hamiltoniano é  $\Psi_k^-$ , definida na Eq. (2.49). Já os autovalores são calculados através do determinante

$$\begin{vmatrix} \epsilon - \mathcal{U}_{AD} - E & \mathcal{U}_{AB} - \mathcal{U}_{AC} \\ \mathcal{U}_{AB}^* - \mathcal{U}_{AC}^* & \epsilon - \mathcal{U}_{AD} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.55)$$

o que nos fornece a seguinte relação de dispersão

$$E_{\pm}^{\text{inferior}}(\mathbf{k}) = \epsilon - \mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) \pm |\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) - \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k})|. \quad (2.56)$$

É importante salientar que o modelo de duas bandas, ao qual nos referiremos ao longo deste trabalho, é o regime de quando consideramos apenas  $\mathcal{H}_{\text{superior}}$ , ou seja, quando levamos em conta apenas as duas bandas mais próximas ao *gap*.

## 2.2 Modelo contínuo

Conforme mencionado no Capítulo 1, o fosforeno é um semicondutor que apresenta *gap* direto relativamente pequeno, da ordem de 2,0 eV. Por outro lado, a energia térmica associada à temperatura ambiente é da ordem de  $E_{\text{ambiente}} = k_B T_{\text{ambiente}} \approx 1/40$  eV, onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T_{\text{ambiente}} = 295K$  aproximadamente. Portanto, é esperado que o fosforeno, quando em seu estado natural (isto é, não dopado), comporte-se como um isolante quando submetido a temperaturas da ordem da temperatura ambiente ( $\approx 300$  K). Do exposto, decorre que o nível de Fermi desse material se localiza na região do *gap*, implicando assim em uma banda de valência completamente preenchida e em uma banda de condução desocupada, conforme ilustrado na Figura 2.5.

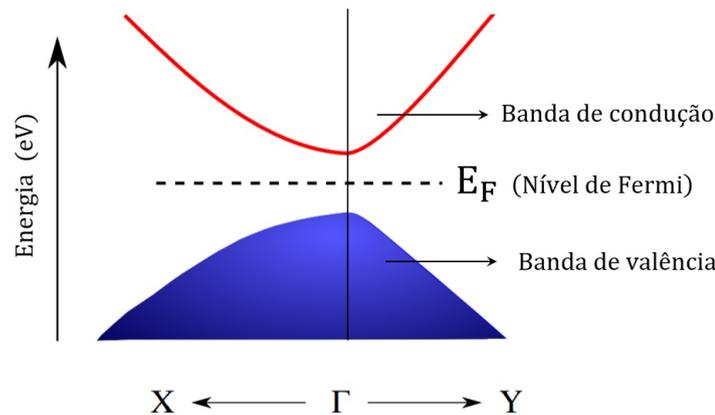


Figura 2.5 – Esboço da dispersão de baixas energias do fosforeno. O contínuo de estados azuis (vermelhos) representam buracos (elétrons).

Contudo, à medida que aumentamos a temperatura do material (acarretando, assim, em uma maior agitação térmica das partículas) proporcionamos ao sistema um aumento na probabilidade de que os elétrons presentes na banda de valência passem a integrar a banda de condução, diminuindo o caráter isolante do material. Infelizmente, embora o aumento da temperatura seja eficaz em induzir um excesso de portadores de cargas na banda de condução (e um excesso de buracos na banda de valência), tal método é pouco convencional para fins de aplicação industrial, uma vez que espera-se que dispositivos eletrônicos fabricados a partir do fosforeno operem em temperatura ambiente.

Um outro mecanismo eficaz em induzir um excesso de portadores de carga é a dopagem, que consiste na adição de impurezas químicas elementares na amostra, possibilitando um maior controle das propriedades eletrônicas do material. Uma amostra dopada com uma impureza doadora (tipo N) apresenta, majoritariamente, elétrons como portadores de carga elétrica (sendo os buracos minoritários). Por outro lado, uma amostrada dopada com uma impureza aceitadora (tipo P) apresenta buracos como portadores majoritários de carga elétrica (sendo os elétrons minoritários), conforme esquematizado nas Figuras 2.6 (a) e (b).

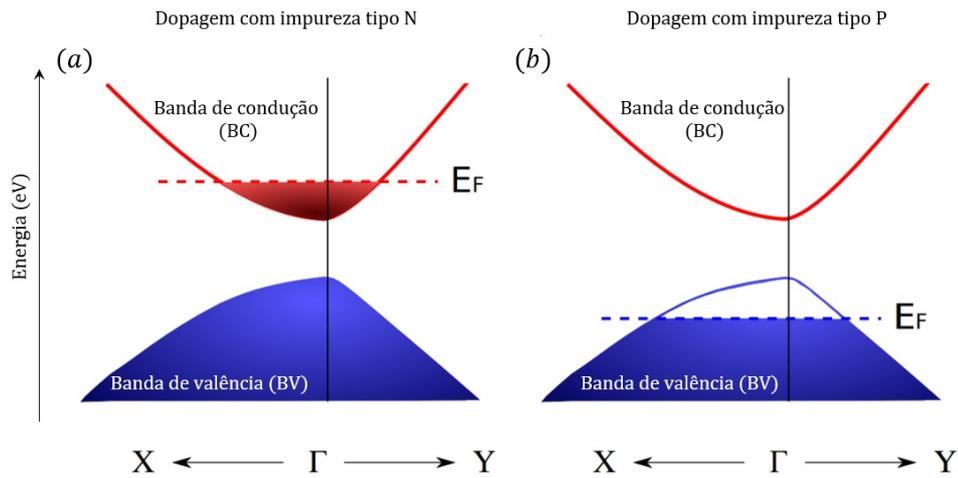


Figura 2.6 – Esboço da dispersão de baixas energias do fosforeno quando dopado com uma impureza tipo N em (a) e uma impureza tipo P em (b).

Embora os dois tipos de dopagem supracitados culminem em diferentes propriedades eletrônicas para a amostra; em ambos os casos, as concentrações de elétron e/ou buracos induzidos em laboratório possuem energias próximas a energia do *gap*, conforme ilustrado na Figuras 2.6 (a) e (b). Dessa maneira, tais cargas induzidas só podem apresentar comprimentos de onda dentro de uma faixa delimitada pelos valores de  $k$  correspondentes ao intervalo de energias. Entretanto, ainda da Figura 2.6, podemos ver que o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução estão localizados no centro da zona de Brillouin, no denominado ponto  $\Gamma$ , cuja os valores de  $k$  são próximos de zero, o que implica que esses portadores de carga induzidos estão associados a grandes comprimentos de onda. Por isso a importância do estudo do comportamento de elétrons e buracos no regime de longos comprimentos de onda.

Contudo, apenas amostras suficientemente grandes suportam excitações provenientes de comprimentos de onda largos. Assim, é importante salientar que a descrição que desenvolveremos nessa subseção só é válida no regime de  $k$  pequeno (ou grandes valores de  $\lambda$ ) e quando as amostras são suficientemente grandes. Por outro lado, grandes amostras apresentam um enorme número de sítios atômicos, fazendo assim com que a caráter discreto da estrutura seja substituído por um contínuo de átomos. Por esse motivo, a aproximação de longos comprimentos de onda é, por vezes, chamada de aproximação do contínuo (ou modelo contínuo).

Doravante, trabalharemos sempre no regime do modelo de duas bandas, isto é, sempre levando em consideração a matriz  $\mathcal{H}_{\text{superior}}$ , fornecida na Eq. (2.51), que a partir de agora denominaremos apenas por matriz  $\mathcal{H}$ . Nesse regime, consideramos apenas os valores de energia próximos ao ponto  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = 0$ ), o que nos permite fazer uma expansão em série de Taylor para cada um dos elementos da matriz  $\mathcal{H}$  em torno deste ponto. Realizando tal expansão nos fatores de estrutura:  $\mathcal{U}_{AB}$ ,  $\mathcal{U}_{AC}$  e  $\mathcal{U}_{AD}$ , onde manteremos apenas os termos

de até segunda ordem em  $k_x$  e  $k_y$ , obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) &= 2t_1 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \exp \left[ -ik_y d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] + \\
&+ 2t_3 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \exp \left[ ik_y \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right] \right] \\
&\approx 2(t_1 + t_3) - (t_1 + t_3) \left[ d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2 k_x^2 \\
&- \left\{ t_1 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2 + t_3 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right]^2 \right\} k_y^2 \\
&+ i \left\{ 2t_3 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right] - 2t_1 d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right\} k_y, \tag{2.57}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) &= t_2 \exp [ik_y d_2 \cos(\beta)] + t_5 \exp \left\{ -ik_y \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right] \right\} \\
&\approx (t_2 + t_5) - \left\{ \frac{t_2}{2} [d_2 \cos(\beta)]^2 + \frac{t_5}{2} \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right]^2 \right\} k_y^2 \\
&+ i \left\{ t_2 d_2 \cos(\beta) - t_5 \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right] \right\} k_y, \tag{2.58}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) &= 4t_4 \cos \left[ k_x d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right] \cos \left\{ k_y \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right] \right\} \\
&\approx 4t_4 - 2t_4 \left[ d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2 k_x^2 - 4t_4 \left[ d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \sin(\beta) \right]^2 k_y^2, \tag{2.59}
\end{aligned}$$

de tal modo que

$$\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k}) + \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k}) \approx \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 + i\chi k_y, \tag{2.60}$$

$$\mathcal{U}_{AB}(\mathbf{k})^* + \mathcal{U}_{AC}(\mathbf{k})^* \approx \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 - i\chi k_y, \tag{2.61}$$

$$\mathcal{U}_{AD}(\mathbf{k}) \approx u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2, \tag{2.62}$$

onde,

$$u_0 = 4t_4, \tag{2.63}$$

$$\delta = t_2 + t_5 + 2(t_1 + t_3), \tag{2.64}$$

$$\eta_x = -2t_4 \left[ d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2, \tag{2.65}$$

$$\eta_y = -2t_4 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right]^2, \tag{2.66}$$

$$\gamma_x = -(t_1 + t_3) \left[ d_1 \sin \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2, \tag{2.67}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_y &= -t_1 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \right]^2 - t_3 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right]^2 - \frac{t_2}{2} [d_2 \cos(\beta)]^2 \\
&- \frac{t_5}{2} \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right]^2, \tag{2.68}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi &= t_2 d_2 \cos(\beta) + 2t_3 \left[ d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + 2d_2 \cos(\beta) \right] - 2t_1 d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) \\
&- t_5 \left[ 2d_1 \cos \left( \frac{\alpha_1}{2} \right) + d_2 \cos(\beta) \right], \tag{2.69}
\end{aligned}$$

A Tabela 2.2 apresenta os valores numéricos dos parâmetros descritos acima.

Tabela 2.2: Valores numéricos dos parâmetros do modelo contínuo.

Parâmetros
$u_0 = -0,42 \text{ eV}$
$\delta = 0,76 \text{ eV}$
$\eta_x = 0,58 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$
$\eta_y = 1,01 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$
$\gamma_x = 3,93 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$
$\gamma_y = 3,83 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$
$\chi = 5,25 \text{ eV} \cdot \text{Å}$

Assim, substituindo as Eq. (2.60), (2.61) e (2.62) na Eq. (2.51), vem

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2 & \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 + i\chi k_y \\ \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 - i\chi k_y & u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2 \end{pmatrix}, \quad (2.70)$$

onde tomamos  $\epsilon = 0$ . A matriz acima, Eq. (2.70), é o Hamiltoniano do chamado modelo contínuo e descreve o comportamento de elétrons e buracos, em uma monocamada de fósforo negro, no regime de longos comprimentos de onda e levando em conta apenas a contribuição de baixas energias, próximas ao nível de Fermi. A relação de dispersão para o modelo contínuo pode ser obtida via o cálculo do determinante abaixo

$$\begin{vmatrix} u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2 - E & \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 + i\chi k_y \\ \delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 - i\chi k_y & u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.71)$$

o qual fornece

$$E_{\pm}(k_x, k_y) = u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2 \pm \sqrt{(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2}, \quad (2.72)$$

onde  $E_+$  representa a energia da banda de condução e  $E_-$  a energia da banda de valência, ou seja, temos (+) para elétrons e (-) para buracos. A relação de dispersão acima nos mostra que, para baixos valores de  $\mathbf{k}$ , a dispersão é linear (tipo Dirac) na direção  $\Gamma - Y$  mas parabólica (tipo Schrödinger) na direção  $\Gamma - X$ , conforme mencionado na literatura [20].

As autofunções da Eq. (2.70) podem ser facilmente obtidas mediante a definição das funções

$$\varepsilon_1(k_x, k_y) = u_0 + \eta_x k_x^2 + \eta_y k_y^2, \quad (2.73)$$

e

$$\varepsilon_2(k_x, k_y) = \sqrt{(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2}, \quad (2.74)$$

onde esta última se deve ao fato de os elementos da diagonal secundária da matriz (2.70) poderem ser reescritos na forma

$$\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2 \pm i\chi k_y = \sqrt{(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2} e^{\pm i\theta_k} = \varepsilon_2(k_x, k_y) e^{\pm i\theta_k}, \quad (2.75)$$

com

$$\theta_k = \arctg\left(\frac{\chi k_y}{\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2}\right). \quad (2.76)$$

Desse modo, as Eq. (2.72) e Eq. (2.70) assumem, na respectiva ordem, as formas

$$E_{\pm} = \varepsilon_1 \pm \varepsilon_2, \quad (2.77)$$

e

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 e^{i\theta_k} \\ \varepsilon_2 e^{-i\theta_k} & \varepsilon_1 \end{pmatrix}. \quad (2.78)$$

Os autoestados da matriz (2.78), que possui autovalores dados pela Eq. (2.77), são facilmente obtidos e dados por

$$\Psi_{E_+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (2.79)$$

e

$$\Psi_{E_-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (2.80)$$

ou, de modo mais geral,

$$\Psi_{E_{\lambda}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{-i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

onde  $\lambda = \pm 1$ , com sinal positivo (negativo) referindo-se a elétrons (buracos).

## 2.3 Modelo de massa efetiva

O modelo de massa efetiva, que será de grande relevância para esse trabalho, mostra-se importante para o estudo das propriedades eletrônicas de semicondutores, em especial para o fosforeno que apresenta uma estrutura anisotrópica.

Neste modelo, assumimos que um elétron que se encontra em uma rede cristalina sob a ação de uma força externa, causadas eventualmente por campos eletromagnéticos aplicados, comporta-se como um elétron livre, porém, com uma massa modificada (ou efetiva) a qual é inversamente proporcional à derivada segunda da energia com respeito ao vetor de onda  $\mathbf{k}$  [21], ou seja

$$m^*_{\alpha,\beta} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}}, \quad (2.82)$$

onde  $k_{\alpha(\beta)}$  é a componente de  $\mathbf{k}$  na direção  $\alpha(\beta)$ .

Do modelo contínuo, descrito na seção anterior, a relação de dispersão para o fosforeno é dada pela Eq. (2.72). Calculando a derivada segunda da energia com respeito a variável  $k_x$ , obtemos

$$\frac{\partial^2 E_{e(h)}}{\partial k_x^2} = 2\eta_x \pm \left\{ \frac{2\gamma_x (\delta + 3\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)}{\sqrt{(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2}} - \frac{[2\gamma_x k_x (\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)]^2}{\sqrt{[(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2]^3}} \right\}, \quad (2.83)$$

enquanto a derivada segunda com respeito a  $k_y$  vale

$$\frac{\partial^2 E_{e(h)}}{\partial k_y^2} = 2\eta_y \pm \left\{ \frac{[2\gamma_y (\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2) + \chi^2]}{\sqrt{(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2}} - \frac{[2\gamma_y (\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2) + \chi^2]^2 k_y^2}{\sqrt{[(\delta + \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^2)^2 + \chi^2 k_y^2]^3}} \right\}. \quad (2.84)$$

Adotando o regime de pequenos valores para  $k_x$  e  $k_y$  obtemos, na respectiva ordem,

$$\frac{\partial^2 E_{e(h)}}{\partial k_x^2} \approx 2(\eta_x \pm \gamma_x), \quad (2.85)$$

e

$$\frac{\partial^2 E_{e(h)}}{\partial k_y^2} \approx 2 \left( \eta_y \pm \gamma_y \pm \frac{\chi^2}{2\delta} \right). \quad (2.86)$$

Portanto, substituindo as expressões das derivadas segundas da energia, Eq. (2.85) e Eq. (2.86), na Eq. (2.82), obtemos as massas efetivas, dadas por

$$m_x^e = \frac{\hbar^2}{2(\eta_x + \gamma_x)}, \quad (2.87)$$

$$m_x^h = \frac{\hbar^2}{2(\eta_x - \gamma_x)}, \quad (2.88)$$

$$m_y^e = \frac{\hbar^2}{2(\eta_y + \gamma_y + \chi^2/2\delta)}, \quad (2.89)$$

$$m_y^h = \frac{\hbar^2}{2(\eta_y - \gamma_y - \chi^2/2\delta)}, \quad (2.90)$$

com  $e$  ( $h$ ) para elétrons (buracos). Os valores numéricos das massas efetivas podem ser encontrados na Tabela 2.3.

Tabela 2.3: Valores numéricos para as massas efetivas de elétrons e buracos [22]. A constante  $m_0$  é a massa de um elétron livre.

Massas efetivas
$m_0 = 9,1 \times 10^{-31}$ kg
$m_x^e = 0,846 m_0$
$m_x^h = 1,140 m_0$
$m_y^e = 0,166 m_0$
$m_y^h = 0,182 m_0$

Nesta aproximação, a dispersão do fosforeno fica dada por

$$E_e = (u_0 + \delta) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^e} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^e}, \quad (2.91)$$

e

$$E_h = (u_0 - \delta) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^h} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^h}. \quad (2.92)$$

A Figura 2.7 apresenta um gráfico da relação de dispersão para o modelo de duas bandas. A partir deste gráfico podemos concluir que os três modelos concordam, com excelente precisão, para energias menores que 1 eV; o que mostra que, dependendo do problema, o modelo contínuo e o modelo de massa efetiva podem ser utilizados como uma boa aproximação.

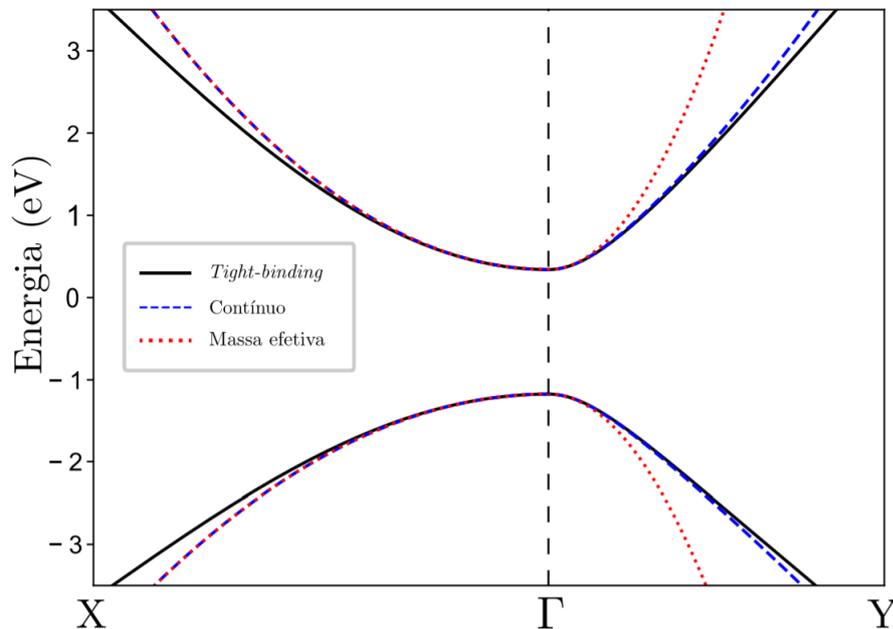


Figura 2.7 – Estrutura de bandas do fosforeno no regime de baixas energias. As linhas pretas e contínuas representam a curva obtida via modelo *tight-binding*, as linhas azuis e tracejadas foram obtidas via modelo contínuo e, por fim, as linhas vermelhas e pontilhadas a estrutura obtida a partir do modelo de massa efetiva.

Devido a grande simplicidade deste modelo o utilizaremos a fim de estudar tanto o problema de tunelamento em uma barreira magnética, como também o problema de superrede de barreiras magnéticas.

É importante ressaltar que embora tenhamos obtido o modelo de massa efetiva considerando a contribuição de cinco *hoppings*, utilizaremos o modelo de dez *hoppings* para a obtenção dos resultados. Isso se justifica pelo fato deste último apresentar uma maior precisão nos resultados.

## 2.4 Massa efetiva para multicamadas

Conforme pode ser consultado na Ref. [26], o Hamiltoniano para o caso de  $N$  camadas de fosforeno, na aproximação do contínuo, deve ser composto por  $N$  blocos de Hamiltonianos de tipo monocamada com os correspondentes coeficientes modificados. Portanto, podemos escrever o Hamiltoniano para  $N$  camadas de fosforeno no regime de baixas energias, na aproximação do contínuo, como sendo

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} u_0^n + \eta_x^n k_x^2 + \eta_y^n k_y^2 & \delta^n + \gamma_x^n k_x^2 + \gamma_y^n k_y^2 + i\chi^n k_y \\ \delta^n + \gamma_x^n k_x^2 + \gamma_y^n k_y^2 - i\chi^n k_y & u_0^n + \eta_x^n k_x^2 + \eta_y^n k_y^2 \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

onde  $u_0^n = u_0 + \lambda_n \delta_{AD'}$ ,  $\eta_x^n = \eta_x + \lambda_n \eta_{AD'}$ ,  $\eta_y^n = \eta_y + \lambda_n \eta_{AD'}$ ,  $\delta^n = \delta + \lambda_n \delta_{AC'}$ ,  $\gamma_x^n = \gamma_x + \lambda_n \gamma_{AC'}$ ,  $\gamma_y^n = \gamma_y + \lambda_n \gamma_{AC'}$  e  $\chi^n = \chi + \lambda_n \chi_{AC'}$ , com  $\lambda_n = \cos[n\pi/(N+1)]$ . Tal resultado nos permite descrever um problema de  $N$  camadas de fosforeno da mesma maneira que fazemos para uma única camada, apenas substituindo os coeficientes pelo seus correspondentes (que dependem do número de camadas).

Segundo a mesma referência, as massas efetivas ao longo das direções  $x$  e  $y$  também são dependentes do número de camadas e são dadas pelas expressões

$$m_x^{e,h} = \frac{\hbar^2}{2(\eta_x^n \pm \gamma_x^n)} \quad \text{e} \quad m_y^{e,h} = \frac{\hbar^2}{2(\eta_y^n \pm \gamma_y^n \pm (\chi^n)^2/2\delta^n)}, \quad (2.94)$$

em que o sinal  $+$ ( $-$ ) corresponde ao ramo eletrônico do elétron (buraco). A Figura 2.8 mostra as massas efetivas em unidades de massa livre do elétron ( $m_0$ ).

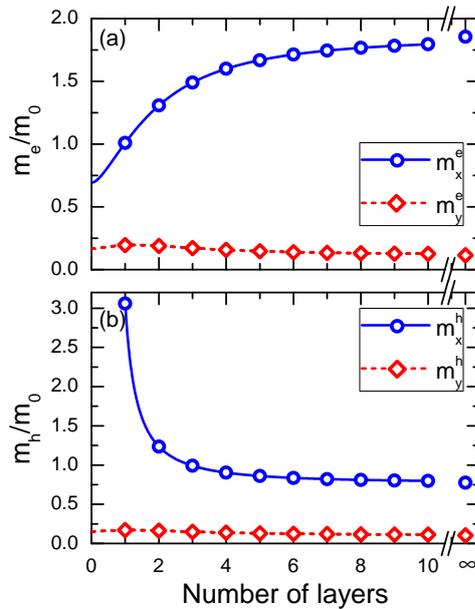


Figura 2.8 – As massas efetivas em unidades de massa livre do elétrons ( $m_0$ ) ao longo das direções  $x$  (curvas sólidas) e  $y$  (curvas tracejadas) para (a) elétrons e (b) buracos, em função do número de camadas. Os símbolos abertos destacam o comportamento da Eq. (2.94) para valores inteiros do número de camadas  $N$  [27].

Observamos que no limite  $N \rightarrow \infty$ , os valores das massas efetivas, para elétrons e buracos, nas duas direções convergem para valores do *bulk*.

A Eq. (2.94) será importante quando formos investigar o problema de tunelamento e superrede para o caso de multicamadas.

## Tunelamento em um sistema anisotrópico

Neste capítulo, investigaremos a transmissão de elétrons através de barreiras magnéticas em uma monocamada de fósforo negro. Nosso sistema consiste em uma barreira magnética, de largura  $L$ , produzida por um campo uniforme perpendicular aos eixos de anisotropia do fosforeno. Tal abordagem é feita através do modelo de massa efetiva e, portanto, se assemelha ao estudo de tunelamento em barreiras de potencial e potenciais escada encontrados em livros introdutórios de mecânica quântica que consiste em resolver a equação de Schrödinger (neste caso com massa anisotrópica) a fim de determinar a probabilidade de transmissão e reflexão.

### 3.1 Descrição do modelo

Vamos considerar um sistema bidimensional anisotrópico no qual a anisotropia é introduzida mediante uma massa efetiva dependente da direção. Foi demonstrado que esse modelo fornece uma descrição razoável do espectro de baixas energias do fosforeno. Em geral, na análise teórica de tal sistema, é conveniente escolher eixos de coordenadas de forma que correspondam às direções de anisotropia (isto é, as direções  $x$  e  $y$ ). Assim, o Hamiltoniano a ser utilizado no presente caso é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y}, \quad (3.1)$$

onde  $m_x$  e  $m_y$  são, respectivamente, as massas efetivas nas direções  $x$  e  $y$ .

Com o intento de deixar o problema mais geral iremos realizar uma rotação no sistema de coordenadas. Assim, o novo sistema de coordenadas  $S'$  que utilizaremos em nossa análise terá seus eixos  $x'$  e  $y'$  rotacionados de um ângulo  $\theta$  em relação aos eixos de anisotropia  $x$  e  $y$ .

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

$$p_x = p'_x \cos \theta - p'_y \sin \theta \quad (3.2)$$

e

$$p_y = p'_x \text{sen}\theta + p'_y \text{cos}\theta. \quad (3.3)$$

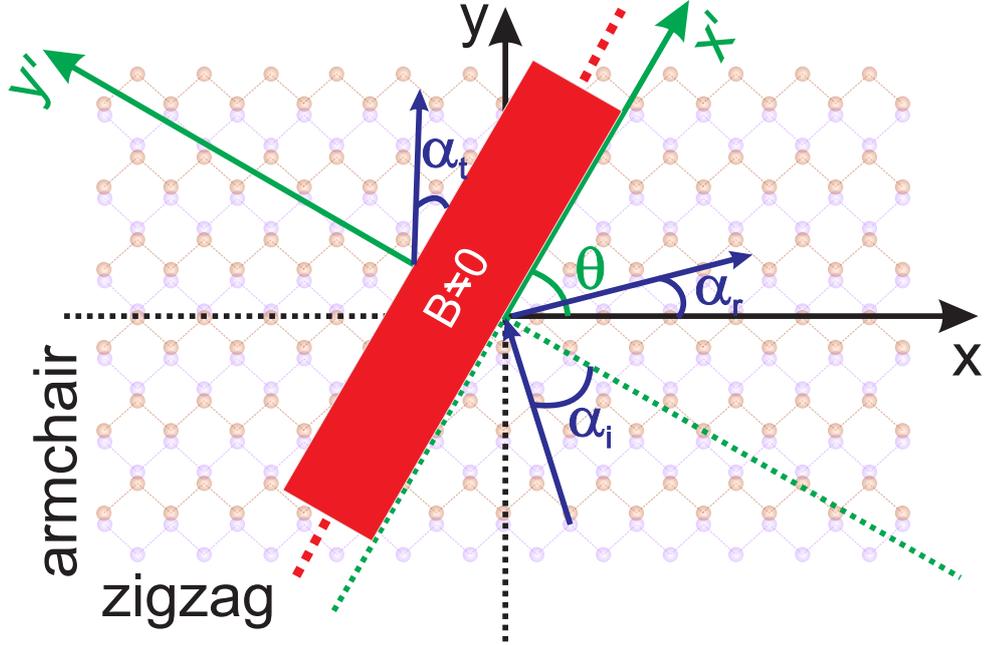


Figura 3.1 – Direção dos eixos cristalográficos ( $x$  e  $y$ ) e do sistema de coordenadas utilizado ( $x'$  e  $y'$ ). A barreira magnética possui interfaces em  $y' = 0$  e  $y' = L$ . Os termos  $\alpha_i$ ,  $\alpha_r$  e  $\alpha_t$  representam os ângulos da velocidade da onda incidente, refletiva e transmitida, respectivamente.

Substituindo as Eq. (3.2) e (3.3) em (3.1), obtemos

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\cos^2 \theta}{m_x} + \frac{\text{sen}^2 \theta}{m_y} \right] p_x'^2 + \frac{1}{2} \left[ \frac{\text{sen}^2 \theta}{m_x} + \frac{\cos^2 \theta}{m_y} \right] p_y'^2 + \left[ \frac{1}{m_y} - \frac{1}{m_x} \right] \text{sen}\theta \text{cos}\theta p'_x p'_y, \quad (3.4)$$

que pode ser escrito de modo simplificado na forma

$$\mathcal{H} = \frac{p_x'^2}{2\mu_x} + \frac{p_y'^2}{2\mu_y} + \frac{p'_x p'_y}{\mu}, \quad (3.5)$$

onde

$$\frac{1}{\mu_x} = \frac{\cos^2 \theta}{m_x} + \frac{\text{sen}^2 \theta}{m_y}, \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{\mu_y} = \frac{\text{sen}^2 \theta}{m_x} + \frac{\cos^2 \theta}{m_y} \quad (3.7)$$

e

$$\frac{1}{\mu} = \left[ \frac{1}{m_y} - \frac{1}{m_x} \right] \text{sen}\theta \text{cos}\theta. \quad (3.8)$$

Observe que a Eq. (3.5) representa uma elipse rotacionada no espaço dos momentos  $p'_x$  e  $p'_y$ .

Iremos agora determinar a equação que descreve a função de onda para um elétron se propagando no fosforeno. Sem perda de generalidade vamos assumir invariância translacional na direção  $x'$  o que leva o Hamiltoniano a comutar com  $p'_x$ , e, assim, a função de onda pode ser escrita<sup>1</sup> como

$$\Psi(x', y') = \psi(y') e^{ik'_x x'}, \quad (3.9)$$

com  $p'_x = \hbar k'_x$  e  $p'_y = \hbar k'_y = -i\hbar \partial_{y'}$ . Desse modo, o Hamiltoniano é escrito na forma

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} - \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y'^2} - \frac{i\hbar^2 k'_x}{\mu} \frac{\partial}{\partial y'}. \quad (3.10)$$

Substituindo na equação de Schrödinger,  $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$ , e considerando soluções do tipo  $\psi(y') \propto e^{ik'_y y'}$ , que representam ondas planas (elétrons balísticos), obtemos

$$\mathcal{H}\psi = \left[ \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 k'_x k'_y}{\mu} \right] \psi = E\psi. \quad (3.11)$$

Assim,

$$\left( \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \right) k_y'^2 + \left( \frac{\hbar^2 k'_x}{\mu} \right) k'_y + \left( \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} - E \right) = 0, \quad (3.12)$$

onde obtemos os dois valores possíveis para  $k'_y$ , dados por

$$k'_y \equiv k_y'^{\pm} = -\frac{\mu_y}{\mu} k'_x \pm \kappa, \quad (3.13)$$

onde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \left( \frac{\mu_y}{\mu_x} - \frac{\mu_y^2}{\mu^2} \right) k_x'^2} = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \frac{\mu_y^2 k_x'^2}{m_x m_y}}. \quad (3.14)$$

Logo a função de onda é dada por

$$\Psi(x', y') = \left( A_1 e^{ik_y'^+ y'} + A_2 e^{ik_y'^- y'} \right) e^{ik'_x x'} \quad (3.15)$$

onde  $A_1$  e  $A_2$  são constantes.

## 3.2 Hamiltoniano com a presença de campo magnético

Vamos agora considerar o efeito de um campo magnético externo perpendicular ao plano que contém o fosforeno (ou seja, perpendicular aos eixos de anisotropia) e que seja uniforme. Para isso escolheremos um *gauge* para o potencial vetor,  $\mathbf{A}$ , de modo que suas componentes tenham apenas dependência em  $y'$ , uma opção conveniente é

$$\mathbf{A} = \left( -By', B \frac{\mu_y}{\mu} y', 0 \right). \quad (3.16)$$

A escolha de uma dependência nas componentes  $A_x$  e  $A_y$  é necessária para evitar que o Hamiltoniano para o caso com aplicação de campo magnético se torne não hermitiano.

<sup>1</sup>Neste caso temos que  $k'_x$  é um bom número quântico.

Incluïremos agora a presença do campo magnético mediante o acomplamento mínimo<sup>2</sup> (ou substituição de Peierls)

$$\mathbf{p}' \rightarrow \Pi = \mathbf{p}' - e\mathbf{A}, \quad (3.17)$$

o que implica em

$$p'_x \rightarrow \Pi_x = p'_x - eA_x = p'_x + eBy' \quad (3.18)$$

e

$$p'_y \rightarrow \Pi_y = p'_y - eA_y = p'_y - eB\frac{\mu_y}{\mu}y'. \quad (3.19)$$

Substituindo as expressões acima, Eq. (3.18) e (3.19), na Eq. (3.5) ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_m &= \frac{\Pi_x^2}{2\mu_x} + \frac{\Pi_y^2}{2\mu_y} + \frac{\Pi_x\Pi_y}{\mu} \\ &= \frac{(p'_x + eBy')^2}{2\mu_x} + \frac{\left(p'_y - eB\frac{\mu_y}{\mu}y'\right)^2}{2\mu_y} + \frac{(p'_x + eBy')(p'_y - eB\frac{\mu_y}{\mu}y')}{\mu}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Fazendo  $p'_x = \hbar k'_x$  e  $p'_y = \hbar k'_y = -i\hbar\partial_{y'}$  na Eq. (3.20) e organizando os termos obtemos

$$\mathcal{H}_m = -\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y'^2} - i\frac{\hbar^2 k'_x}{\mu} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{\Gamma}{2\mu_x} (eBy' + \hbar k'_x)^2 + (1 - \Gamma) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x}, \quad (3.21)$$

onde

$$\Gamma = 1 - \frac{\mu_x\mu_y}{\mu^2}. \quad (3.22)$$

Portanto, aplicando na equação de Schrödinger,  $\mathcal{H}_m\Psi = E\Psi$ , obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2\Psi}{\partial y'^2} - i\frac{\hbar^2 k'_x}{\mu} \frac{\partial\Psi}{\partial y'} + \frac{\Gamma}{2\mu_x} (eBy' + \hbar k'_x)^2 \Psi + (1 - \Gamma) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} \Psi = E\Psi. \quad (3.23)$$

Fazendo uma transformação de coordenadas definida por

$$\xi = y' + \frac{\hbar k'_x}{eB} \quad (3.24)$$

e a frequência de cíclotron para um sistema anisotrópico rotacionado como

$$\omega_c^2 = \Gamma \left( \frac{eB}{\mu_x} \right)^2, \quad (3.25)$$

podemos escrever

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2\Psi}{\partial \xi^2} - i\frac{\hbar^2 k'_x}{\mu} \frac{\partial\Psi}{\partial \xi} + \frac{\mu_x\omega_c^2\xi^2}{2}\Psi = \left[ E - (1 - \Gamma) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} \right] \Psi. \quad (3.26)$$

Definindo agora as novas energias,  $E_c$ , como

$$E_c = E - (1 - \Gamma) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x}, \quad (3.27)$$

<sup>2</sup>Para maiores detalhes consulte o apêndice A.

vem

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} - i \frac{\hbar^2 k'_x}{\mu} \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} + \frac{\mu_x \omega_c^2 \xi^2}{2} \Psi = E_c \Psi. \quad (3.28)$$

Assumindo soluções do tipo

$$\Psi(x, y) \propto e^{-i\beta\xi} \psi(\xi), \quad (3.29)$$

onde  $\beta = \frac{\mu_y k'_x}{\mu}$ , a equação acima assume a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \left[ \frac{\mu_x \omega_c^2 \xi^2}{2} - \frac{\hbar^2 k_x^2 \mu_y}{2\mu^2} \right] \psi = E_c \psi, \quad (3.30)$$

ou ainda

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \left[ \frac{k_x^2 \mu_y^2}{\mu^2} + \frac{2E_c \mu_y}{\hbar^2} - \frac{\mu_x \mu_y \omega_c^2}{\hbar^2} \xi^2 \right] \psi = 0, \quad (3.31)$$

que pode ser simplificada, mediante o uso da Eq. (3.27), para

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \left[ \frac{2E_c \mu_y}{\hbar^2} - \frac{\mu_x \mu_y \omega_c^2}{\hbar^2} \xi^2 \right] \psi = 0. \quad (3.32)$$

Realizaremos agora uma nova transformação de coordenadas,  $\xi \rightarrow z$ , definida por

$$\xi = \alpha z \quad \text{com} \quad \alpha = \left( \frac{\hbar^2}{4\mu_x \mu_y \omega_c^2} \right)^{1/4}. \quad (3.33)$$

Aplicando tal transformação na Eq. (3.32), obtemos

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - \left( \frac{z^2}{4} + a \right) \psi(z) = 0, \quad (3.34)$$

onde

$$a = -\sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_x} \frac{E^2}{\hbar^2 \omega_c^2}}. \quad (3.35)$$

Segundo a referência [28], a solução da Eq. (3.34) é

$$\psi(z) = B_1 e^{-\frac{z^2}{4}} F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z^2}{2} \right) + B_2 z e^{-\frac{z^2}{4}} F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z^2}{2} \right), \quad (3.36)$$

onde  $B_j$ , com  $j = 1, 2$ , são constantes e  $F_1$  são as funções hipergeométricas confluentes de primeiro tipo, cuja a definição é

$$F_1(a; b; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)} z^n}{b^{(n)} n!}, \quad (3.37)$$

onde

$$a^{(0)} = 1 \quad \text{e} \quad a^{(n)} = a(a+1)(a+2) \dots (a+n-1). \quad (3.38)$$

Assim, os autoestados na região em que há um campo magnético atuante são dados por

$$\Psi(x', y') = \left[ B_1 F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z^2}{2} \right) + B_2 z F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z^2}{2} \right) \right] e^{-\left(\frac{z^2}{4} + i\beta\alpha z\right)} e^{ik'_x x'}. \quad (3.39)$$

### 3.3 Tunelamento em uma barreira magnética

Investigaremos agora o problema do tunelamento anisotrópico em uma barreira magnética. Assumiremos, sem perda de generalidade, que a barreira está situada entre  $y' = 0$  e  $y' = L$  o que divide o fosforeno em três regiões de interesse, conforme mostrado nos gráficos da Figura 3.2 .

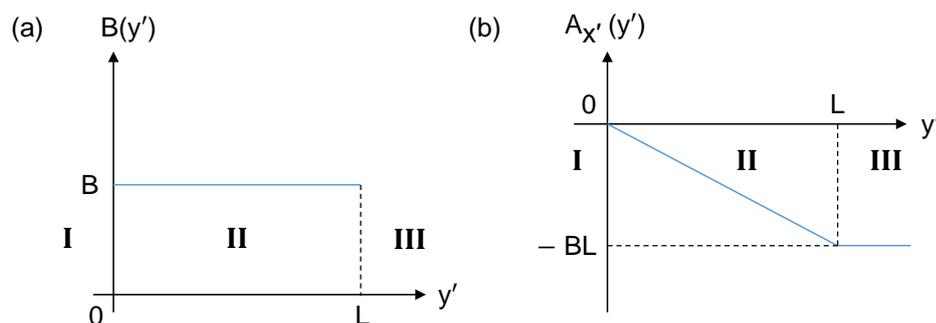


Figura 3.2 – Em (a) é apresentado o gráfico de  $B$  em função de  $y'$  para o problema de uma barreira magnética e em (b) o gráfico da componente  $x'$  do potencial vetor para o mesmo problema.

Na região **I**,  $y' \in ] - \infty, 0[$ , não temos a atuação de campo magnético e consequentemente o potencial vetor é uma constante que assumimos, por conveniência, como sendo nula. Portanto, segundo a Eq. (3.15), a função de onda nesta região é dada por

$$\Psi_1(x', y') = \psi_1(y') e^{ik'_x x'}, \quad (3.40)$$

onde

$$\psi_1(y') = A_1 e^{ik'_1 y'} + A_2 e^{ik'_1 y'}, \quad (3.41)$$

com

$$k_1^{\pm} = -\frac{\mu_y}{\mu} k'_x \pm \kappa_1 \quad \text{e} \quad \kappa_1 = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \frac{\mu_y^2 k_x'^2}{m_x m_y}}. \quad (3.42)$$

Estamos interessados em obter a amplitude de probabilidade de transmissão  $t$  (e de reflexão  $r$ ), isto é, a amplitude de probabilidade que o elétron consiga atravessar (refletir) a barreira magnética. Neste caso, é costume considerar uma onda plana vindo da esquerda, o que é feito através das seguintes definições:  $A_1 = 1$  e  $A_2 = r$ . Deste modo, temos que

$$\psi_1(y') = e^{ik'_1 y'} + r e^{ik'_1 y'}. \quad (3.43)$$

Na região **II**,  $y' \in [0, L]$ , é onde temos a presença de campo magnético. Segundo a Eq. (3.39), a função de onda para essa região é dada por

$$\Psi_2(x', y') = \psi_2(z) e^{ik'_x x'}, \quad (3.44)$$

onde

$$\psi_2(z) = \left[ B_1 F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z^2}{2} \right) + B_2 z F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z^2}{2} \right) \right] e^{-\left(\frac{z^2}{4} + i\beta\alpha z\right)}. \quad (3.45)$$

Na região **III**,  $y' \in ]L, \infty[$ , não temos a presença de campo magnético e, portanto, o potencial vetor é novamente constante; entretanto, dessa vez, não podemos considerá-lo nulo. Para a esta região a função de onda<sup>3</sup> é dada por

$$\Psi_3(x', y') = \psi_3(y') e^{ik'_x x'}, \quad (3.46)$$

onde

$$\psi_3(y') = C_1 e^{ik'_3 y'} + C_2 e^{ik'_3 y'}, \quad (3.47)$$

em que  $C_j$ , com  $j = 1, 2$ , são constantes,

$$k'_3{}^{\pm} = -\frac{\mu_y}{\mu} k'_x \pm \kappa_3 \quad \text{e} \quad \kappa_3 = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \frac{\mu_y^2}{m_x m_y} \left( k'_x + \frac{eBL}{\hbar} \right)^2}. \quad (3.48)$$

Tomando  $C_2 = 0$  e  $C_1 = t$ , com  $t$  sendo o referido coeficiente de transmissão, ficamos com

$$\psi_3(y') = t e^{ik'_3 y'}. \quad (3.49)$$

Para obtermos os coeficientes  $t$  e  $r$  precisamos das condições de contorno do problema. Da literatura<sup>4</sup>, vemos que tais condições para as funções de onda são a continuidade da própria função de onda (que está associada a conservação da probabilidade) e da componente do operador velocidade que é normal à interface aplicada na função de onda de modo à conservar a densidade de corrente. Observe que isso contrasta com o caso de massa efetiva isotrópica, onde é suficiente tomar a continuidade da função de onda e sua derivada.

Por definição o operador velocidade para um sistema descrito por um Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  é dado por

$$v_i^{(j)} = \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p_i}, \quad (3.50)$$

com  $i = x', y'$ . Além disso, introduzimos o índice  $j$ , com  $j = 1, 2$  ou  $3$ , para especificar a região em que o operador atua.

No entanto, conforme discutido, nos interessa apenas a continuidade componente do operador velocidade que é normal à interface aplicada na função de onda, isto é, a componente  $y'$ . Assim, escrevemos

$$v_{y'}^{(j)} = \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial p'_{y'}}. \quad (3.51)$$

<sup>3</sup>Para a obtenção da função de onda da região **III** basta aplicar as transformações  $k_x \rightarrow k_x + \frac{eBL}{\hbar}$  e  $k_y \rightarrow k_y - \frac{eBL}{\hbar} \frac{\mu_y}{\mu}$  na função de onda da região **I**.

<sup>4</sup>Para mais detalhes veja a referência [24].

Para a primeira região,  $j = 1$ , temos

$$\mathcal{H}_1 = \frac{p_x'^2}{2\mu_x} + \frac{p_y'^2}{2\mu_y} + \frac{p_x'p_y'}{\mu}, \quad (3.52)$$

e, portanto,

$$v_{y'}^{(1)} = \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial p_y'} = \frac{p_y'}{\mu_y} + \frac{p_x'}{\mu} = \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{k_x'}{\mu} \right]. \quad (3.53)$$

Para a segunda região,  $j = 2$ , temos

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\Pi_x^2}{2\mu_x} + \frac{\Pi_y^2}{2\mu_y} + \frac{\Pi_x \Pi_y}{\mu}, \quad (3.54)$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} v_{y'}^{(2)} &= \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \Pi_y} = \frac{\Pi_y}{\mu_y} + \frac{\Pi_x}{\mu} \\ &= -\frac{1}{\mu_y} \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial y'} + eB \frac{\mu_y}{\mu} y' \right] + \frac{1}{\mu} [\hbar k_x' + eBy'] \\ &= \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{k_x'}{\mu} \right]. \end{aligned} \quad (3.55)$$

O operador acima,  $v_{y'}^{(2)}$ , pode ser convenientemente reescrito em termos da variável  $\xi$  da seguinte maneira

$$v_{\xi}^{(2)} = \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{k_x'}{\mu} \right], \quad (3.56)$$

e em termos da variável  $z$  na forma

$$v_z^{(2)} = \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{k_x'}{\mu} \right]. \quad (3.57)$$

Para a terceira região,  $j = 3$ , temos

$$v_{y'}^{(3)} = \frac{(p_y' - eBL \frac{\mu_y}{\mu})}{\mu_y} + \frac{(p_x' + eBL)}{\mu} = \frac{p_y'}{\mu_y} + \frac{p_x'}{\mu} = \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{k_x'}{\mu} \right]. \quad (3.58)$$

Precisamos impor agora as seguintes condições de contorno

$$\psi_1(y')|_{y'=0} = \psi_2(y')|_{y'=0}, \quad (3.59)$$

$$\psi_2(y')|_{y'=L} = \psi_3(y')|_{y'=L}, \quad (3.60)$$

$$v_{y'}^{(1)} \psi_1(y')|_{y'=0} = v_{y'}^{(2)} \psi_2(y')|_{y'=0}, \quad (3.61)$$

$$v_{y'}^{(2)} \psi_2(y')|_{y'=L} = v_{y'}^{(3)} \psi_3(y')|_{y'=L}. \quad (3.62)$$

Contudo, podemos simplificar as condições (3.61) e (3.62), observando que

$$\begin{aligned} v_{y'}^{(1)} \psi_1(y')|_{y'=0} &= v_{y'}^{(2)} \psi_2(y')|_{y'=0}, \\ v_{y'}^{(1)} \psi_1(y')|_{y'=0} &= v_z^{(2)} \psi_2(z)|_{z=z_0}, \\ \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{\partial}{\partial y'} + \frac{k_x'}{\mu} \right] \psi_1(y')|_{y'=0} &= \hbar \left[ \frac{-i}{\mu_y} \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{k_x'}{\mu} \right] \psi_2(z)|_{z=z_0}, \\ \frac{\partial}{\partial y'} \psi_1(y')|_{y'=0} &= \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \psi_2(z)|_{z=z_0}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

com uma demonstração análoga para a Eq. (3.62). Assim, de maneira simplificada, as condições de contorno do problema serão

$$\psi_1(y')|_{y'=0} = \psi_2(z)|_{z=z_0}, \quad (3.64)$$

$$\psi_2(z)|_{z=L} = \psi_3(y')|_{y'=L}, \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial y'}\psi_1(y')|_{y'=0} = \frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial z}\psi_2(z)|_{z=z_0}, \quad (3.66)$$

$$\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial z}\psi_2(z)|_{z=z_L} = \frac{\partial}{\partial y'}\psi_3(y')|_{y'=L}, \quad (3.67)$$

onde

$$z_0 = \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\hbar k'_x}{eB} \right) \quad \text{e} \quad z_L = \frac{1}{\alpha} \left( L + \frac{\hbar k'_x}{eB} \right). \quad (3.68)$$

Das condições expressas nas Eq. (3.64) e (3.65), obtemos respectivamente

$$1 + r = \left[ B_1 F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z_0^2}{2} \right) + B_2 z_0 F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z_0^2}{2} \right) \right] e^{-\left( \frac{z_0^2}{4} + i\beta\alpha z_0 \right)}. \quad (3.69)$$

e

$$\left[ B_1 F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z_L^2}{2} \right) + B_2 z_L F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z_L^2}{2} \right) \right] e^{-\left( \frac{z_L^2}{4} + i\beta\alpha z_L \right)} = t e^{ik'_3 L}, \quad (3.70)$$

Com o intento de simplificar a notação iremos definir

$$\Gamma_1^{0,L} = F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right) \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right], \quad (3.71)$$

$$\Gamma_2^{0,L} = z_{0,L} F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right) \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right]. \quad (3.72)$$

Aplicando as definições acima, Eq. (3.71) e (3.72), nas Eq. (3.73) e (3.74), obtemos respectivamente

$$1 + r = \Gamma_1^0 B_1 + \Gamma_2^0 B_2 \quad (3.73)$$

e

$$t e^{ik'_3 L} = \Gamma_1^L B_1 + \Gamma_2^L B_2. \quad (3.74)$$

Desse modo a Eq. (3.66) fornece

$$ik'_1{}^+ + ik'_1{}^- r = \tilde{\Gamma}_1^0 B_1 + \tilde{\Gamma}_2^0 B_2, \quad (3.75)$$

enquanto a Eq. (3.67) nos dá

$$ik'_3{}^+ e^{ik'_3 L} t = \tilde{\Gamma}_1^L B_1 + \tilde{\Gamma}_2^L B_2, \quad (3.76)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_1^{0,L} &= \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_1^{0,L} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z^2}{2} \right) \exp \left[ - \left( \frac{z^2}{4} + i\beta\alpha z \right) \right] \right\} \Bigg|_{z=z_{0,L}} \\ &= \frac{1}{\alpha} \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right] \left\{ \left( a + \frac{1}{2} \right) F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{5}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{\alpha} \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right] \left( \frac{z_{0,L}}{2} + i\beta\alpha \right) F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.77)$$

e

$$\begin{aligned}
\tilde{\Gamma}_2^{0,L} &= \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_2^{0,L} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ z F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z^2}{2} \right) \exp \left[ - \left( \frac{z^2}{4} + i\beta\alpha z \right) \right] \right\} \Big|_{z=z_{0,L}} \\
&= \frac{1}{\alpha} \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right] \left\{ z_{0,L} \left( \frac{a}{3} + \frac{1}{2} \right) F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{7}{4}; \frac{5}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right) \right\} \\
&\quad - \frac{1}{\alpha} \exp \left[ - \left( \frac{z_{0,L}^2}{4} + i\beta\alpha z_{0,L} \right) \right] \left( \frac{z_{0,L}^2}{2} + i\beta\alpha z_{0,L} - 1 \right) F_1 \left( \frac{a}{2} + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{z_{0,L}^2}{2} \right). \quad (3.78)
\end{aligned}$$

Para a obtenção das Eq. (3.77) e (3.78) foi utilizado a relação de recorrência

$$\frac{\partial}{\partial z} F_1(a; b; z) = \frac{a}{b} F_1((a+1); (b+1); z). \quad (3.79)$$

Precisamos agora determinar  $t$  e  $r$  mediante a resolução do sistema constituído pelas Eq. (3.73), Eq. (3.74), Eq. (3.75) e Eq. (3.76), isto é

$$1 + r = \Gamma_1^0 B_1 + \Gamma_2^0 B_2, \quad (3.80)$$

$$t e^{ik_3^+ L} = \Gamma_1^L B_1 + \Gamma_2^L B_2, \quad (3.81)$$

$$ik_1^+ + ik_1^- r = \tilde{\Gamma}_1^0 B_1 + \tilde{\Gamma}_2^0 B_2, \quad (3.82)$$

$$ik_3^+ e^{ik_3^+ L} t = \tilde{\Gamma}_1^L B_1 + \tilde{\Gamma}_2^L B_2. \quad (3.83)$$

Resolvendo o sistema acima encontramos

$$t = \frac{\phi_3}{\phi_2 + \phi_1} \quad (3.84)$$

e

$$r = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_2 + \phi_1}, \quad (3.85)$$

onde

$$\phi_1 = \left( \tilde{\Gamma}_2^0 \tilde{\Gamma}_1^L - \tilde{\Gamma}_1^0 \tilde{\Gamma}_2^L \right) e^{ik_3^+ L} + \left( \tilde{\Gamma}_1^0 \Gamma_2^L - \tilde{\Gamma}_2^0 \Gamma_1^L \right) ik_3^+ e^{ik_3^+ L}, \quad (3.86)$$

$$\phi_2 = \left( \Gamma_1^0 \tilde{\Gamma}_2^L - \Gamma_2^0 \tilde{\Gamma}_1^L \right) ik_1^- e^{ik_3^+ L} + \left( \Gamma_1^0 \Gamma_2^L - \Gamma_2^0 \Gamma_1^L \right) k_1^- k_3^+ e^{ik_3^+ L} \quad (3.87)$$

e

$$\phi_3 = i \left( k_1^+ - k_1^- \right) \left( \tilde{\Gamma}_1^L \Gamma_2^L - \Gamma_1^L \tilde{\Gamma}_2^L \right). \quad (3.88)$$

Assim, as probabilidades de reflexão ( $R$ ) e de transmissão ( $T$ ) são dadas por

$$R = |r|^2 = \left| \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_2 + \phi_1} \right|^2 \quad e \quad T = |t|^2 = \left| \frac{\phi_3}{\phi_2 + \phi_1} \right|^2. \quad (3.89)$$

### 3.4 Método da matriz de transferência

A teoria do espalhamento generaliza uma maneira muito simples para potenciais arbitrariamente localizados (Figura 3.3).

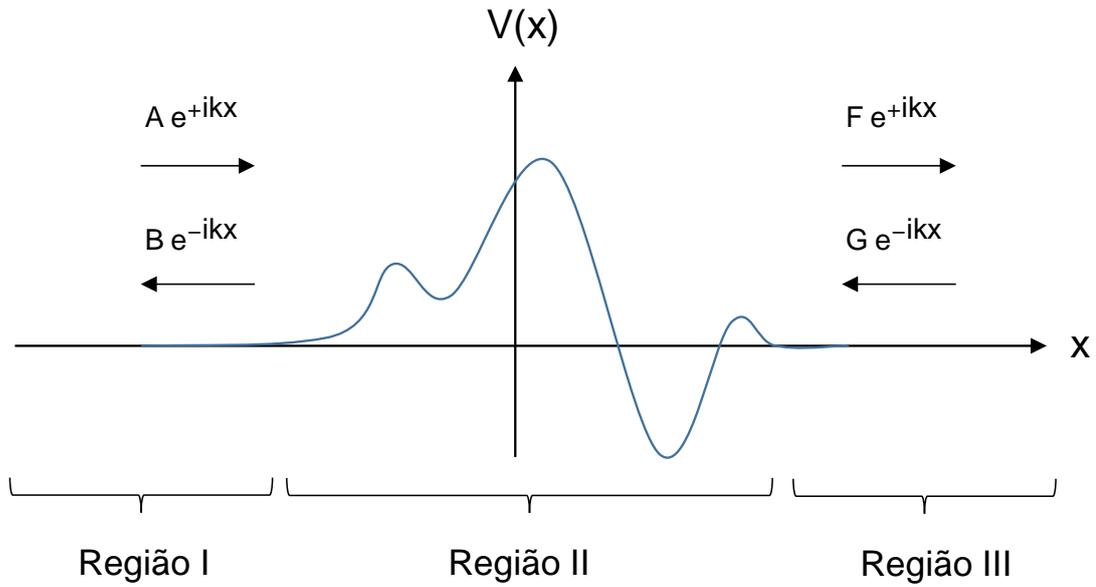


Figura 3.3 – Espalhamento através de um potencial arbitrariamente localizado ( $V(x) = 0$  exceto na região II).

Para a esquerda (região I), temos  $V(x) = 0$ , portanto

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.90)$$

onde  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ . Para a direita (região III),  $V(x)$  é novamente zero e, portanto,

$$\psi_3(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (3.91)$$

Quando situada em uma determinada área (região II), não sabemos dizer a forma da função  $\psi(x)$  até que especifiquemos o potencial. No entanto, como a equação de Schrödinger é uma equação diferencial linear de segunda ordem, a solução geral será

$$\psi_2(x) = Cf(x) + Dg(x), \quad (3.92)$$

em que  $f(x)$  e  $g(x)$  são duas soluções linearmente independentes. Haverá quatro condições de contorno (duas unindo as regiões I e II e mais duas unindo as regiões II e III). Duas dessas condições de contorno poderão ser usadas para eliminar C e D, e as outras duas poderão ser resolvidas para escrevermos B e F em termos de A e G. Assim, teremos

$$B = S_{11}A + S_{12}G \quad \text{e} \quad F = S_{21}A + S_{22}G. \quad (3.93)$$

Os quatro coeficientes  $S_{ij}$ , os quais dependem de  $k$  (e, portanto, de  $E$ ) constituem uma matriz  $\mathbf{S}$ ,  $2 \times 2$ , chamada na literatura de **matriz de espalhamento** (ou matriz  $S$ ). A matriz  $S$  informa as amplitudes de saída (B e F) em termos de amplitudes de entrada (A e G):

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \quad (3.94)$$

No caso típico de espalhamento da esquerda,  $G = 0$ , os coeficientes de reflexão e transmissão serão

$$R_l = \left. \frac{|B|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{11}|^2 \quad \text{e} \quad T_l = \left. \frac{|F|^2}{|A|^2} \right|_{G=0} = |S_{21}|^2. \quad (3.95)$$

Para o espalhamento da direita,  $A = 0$ , temos

$$R_r = \left. \frac{|F|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{22}|^2 \quad \text{e} \quad T_r = \left. \frac{|B|^2}{|G|^2} \right|_{A=0} = |S_{12}|^2. \quad (3.96)$$

Contudo, para alguns fins, é mais conveniente trabalhar com a **matriz de transferência**,  $\mathbf{M}$ , a qual fornece as amplitudes para a direita do potencial ( $F$  e  $G$ ) em termos das da esquerda ( $A$  e  $B$ ):

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (3.97)$$

Em termos dos elementos da matriz  $\mathbf{M}$ , uma transmissão da esquerda (região I) para a direita (região III) possui os coeficientes de reflexão,  $R_l$ , e transmissão,  $T_l$ , dados por

$$R_l = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad \text{e} \quad T_l = \left| \frac{\det(M)}{M_{22}} \right|^2. \quad (3.98)$$

Por outro lado, uma transmissão da direita (região III) para a esquerda (região I) tem seus coeficientes determinados por

$$R_r = \left| \frac{M_{12}}{M_{22}} \right|^2 \quad \text{e} \quad T_r = \frac{1}{|M_{22}|^2}. \quad (3.99)$$

Para aplicar o método da matriz de transferência para o nosso problema precisamos primeiramente reescrever as funções de onda das três regiões na forma

$$\psi_1(y') = A_l e^{ik_1^+ y'} + C_l e^{ik_1^- y'}, \quad (3.100)$$

$$\psi_2(z) = B_1 \Gamma_1(z) + B_2 \Gamma_2(z) \quad (3.101)$$

e

$$\psi_3(y') = A_r e^{ik_3^+ y'} + C_r e^{ik_3^- y'}. \quad (3.102)$$

A Figura 3.4 ilustra esquematicamente a situação que vamos investigar agora.

Impondo novamente as condições de contorno fornecidas nas Eq. (3.64), (3.65), (3.66) e (3.67), obteremos

$$A_l + C_l = \Gamma_1^0 B_1 + \Gamma_2^0 B_2, \quad (3.103)$$

$$e^{ik_3^+ L} A_r + e^{ik_3^- L} C_r = \Gamma_1^L B_1 + \Gamma_2^L B_2, \quad (3.104)$$

$$ik_1^+ A_l + ik_1^- C_l = \tilde{\Gamma}_1^0 B_1 + \tilde{\Gamma}_2^0 B_2, \quad (3.105)$$

$$ik_3^+ e^{ik_3^+ L} A_r + ik_3^- e^{ik_3^- L} C_r = \tilde{\Gamma}_1^L B_1 + \tilde{\Gamma}_2^L B_2, \quad (3.106)$$

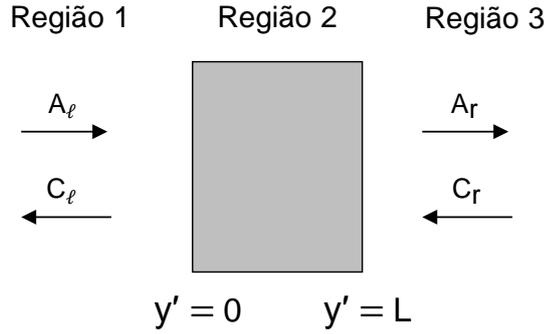


Figura 3.4 – Esquematização do espalhamento. As ondas planas incidentes, dadas pela Eq. (3.100), são espalhadas na região 2 (região acinzentada onde temos a presença de um campo magnético uniforme). As ondas de saída, localizadas na região 3 e fornecidas na Eq. (3.102), consistem em ondas transmitidas através da região de campo magnética, bem como ondas refletidas.

As Eq. (3.103) e (3.105) podem ser escritas do seguinte modo na forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1'^+ & ik_1'^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_1^0 & \Gamma_2^0 \\ \tilde{\Gamma}_1^0 & \tilde{\Gamma}_2^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.107)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{(\Gamma_1^0 \tilde{\Gamma}_2^0 - \Gamma_2^0 \tilde{\Gamma}_1^0)} \begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_2^0 & -\Gamma_2^0 \\ -\tilde{\Gamma}_1^0 & \Gamma_1^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1'^+ & ik_1'^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\gamma_a} \begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_2^0 & -\Gamma_2^0 \\ -\tilde{\Gamma}_1^0 & \Gamma_1^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1'^+ & ik_1'^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.108)$$

onde  $\gamma_a = \Gamma_1^0 \tilde{\Gamma}_2^0 - \Gamma_2^0 \tilde{\Gamma}_1^0$ .

Já as Eq. (3.104) e (3.106) são escrita na forma

$$\begin{pmatrix} e^{ik_3'^+ L} & e^{ik_3'^- L} \\ ik_3'^+ e^{ik_3'^+ L} & ik_3'^- e^{ik_3'^- L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_r \\ C_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_1^L & \Gamma_2^L \\ \tilde{\Gamma}_1^L & \tilde{\Gamma}_2^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.109)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_r \\ C_r \end{pmatrix} &= \frac{1}{i(k_3'^- - k_3'^+) e^{i(k_3'^- + k_3'^+)L}} \begin{pmatrix} ik_3'^- e^{ik_3'^- L} & -e^{ik_3'^- L} \\ -ik_3'^+ e^{ik_3'^+ L} & e^{ik_3'^+ L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1^L & \Gamma_2^L \\ \tilde{\Gamma}_1^L & \tilde{\Gamma}_2^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\gamma_b} \begin{pmatrix} ik_3'^- e^{ik_3'^- L} & -e^{ik_3'^- L} \\ -ik_3'^+ e^{ik_3'^+ L} & e^{ik_3'^+ L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1^L & \Gamma_2^L \\ \tilde{\Gamma}_1^L & \tilde{\Gamma}_2^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.110)$$

onde  $\gamma_b = i(k_3'^- - k_3'^+) e^{i(k_3'^- + k_3'^+)L}$ .

Substituindo a Eq. (3.110) na Eq. (3.108) obtemos

$$\begin{pmatrix} A_r \\ C_r \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma_a \gamma_b} \begin{pmatrix} ik_3^- e^{ik_3^- L} & -e^{ik_3^- L} \\ -ik_3^+ e^{ik_3^+ L} & e^{ik_3^+ L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1^L & \Gamma_2^L \\ \tilde{\Gamma}_1^L & \tilde{\Gamma}_2^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_2^0 & -\Gamma_2^0 \\ -\tilde{\Gamma}_1^0 & \Gamma_1^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1^+ & ik_1^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix}. \quad (3.111)$$

Assim, a matriz de transferência  $\mathbf{M}$  para o problema será

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\gamma_a \gamma_b} \begin{pmatrix} ik_3^- e^{ik_3^- L} & -e^{ik_3^- L} \\ -ik_3^+ e^{ik_3^+ L} & e^{ik_3^+ L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1^L & \Gamma_2^L \\ \tilde{\Gamma}_1^L & \tilde{\Gamma}_2^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_2^0 & -\Gamma_2^0 \\ -\tilde{\Gamma}_1^0 & \Gamma_1^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_1^+ & ik_1^- \end{pmatrix}. \quad (3.112)$$

A matriz  $\mathbf{M}$  pode ser escrita de maneira mais compacta na forma

$$\mathbf{M} = \frac{\phi_3}{2(\phi_1 \phi_5 - \phi_2 \phi_4)} \begin{pmatrix} \phi_5 - \phi_4 & -\phi_5 - \phi_4 \\ -\phi_2 + \phi_1 & \phi_2 + \phi_1 \end{pmatrix}, \quad (3.113)$$

onde

$$\phi_4 = \left( \tilde{\Gamma}_2^0 \tilde{\Gamma}_1^L - \tilde{\Gamma}_1^0 \tilde{\Gamma}_2^L \right) e^{ik_3^- L} + \left( \tilde{\Gamma}_1^0 \Gamma_2^L - \tilde{\Gamma}_2^0 \Gamma_1^L \right) ik_3^- e^{ik_3^- L}, \quad (3.114)$$

e

$$\phi_5 = \left( \Gamma_1^0 \tilde{\Gamma}_2^L - \Gamma_2^0 \tilde{\Gamma}_1^L \right) ik_1^- e^{ik_1^- L} + \left( \Gamma_1^0 \Gamma_2^L - \Gamma_2^0 \Gamma_1^L \right) k_1^- k_3^- e^{ik_3^- L}. \quad (3.115)$$

É interessante ressaltar que

$$R_l = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 = \left| \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_2 + \phi_1} \right|^2 \quad \text{e} \quad T_l = \left| \frac{\det(M)}{M_{22}} \right|^2 = \left| \frac{\phi_3}{\phi_2 + \phi_1} \right|^2, \quad (3.116)$$

o que estar de acordo com a Eq. (3.89).

## 3.5 Múltiplas barreiras magnéticas

Na seção anterior analisamos o problema de uma única barreira magnética e mostramos que as amplitudes da região 3 ( $A_r$  e  $C_r$ ) estão relacionadas com as amplitudes da região 1 ( $A_l$  e  $C_l$ ), veja Figura 3.4, mediante a expressão

$$\begin{pmatrix} A_r \\ C_r \end{pmatrix} = \frac{\phi_3}{2(\phi_1 \phi_5 - \phi_2 \phi_4)} \begin{pmatrix} \phi_5 - \phi_4 & -\phi_5 - \phi_4 \\ -\phi_2 + \phi_1 & \phi_2 + \phi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix}, \quad (3.117)$$

onde

$$\mathbf{M} = \frac{\phi_3}{2(\phi_1 \phi_5 - \phi_2 \phi_4)} \begin{pmatrix} \phi_5 - \phi_4 & -\phi_5 - \phi_4 \\ -\phi_2 + \phi_1 & \phi_2 + \phi_1 \end{pmatrix} \quad (3.118)$$

é a matriz de transferência.

Contudo, iremos agora expandir um pouco mais o problema e estudar a transmissão e a reflexão dos portadores de carga para o caso de múltiplas barreiras magnéticas, conforme esquematizado na Figura 3.5.

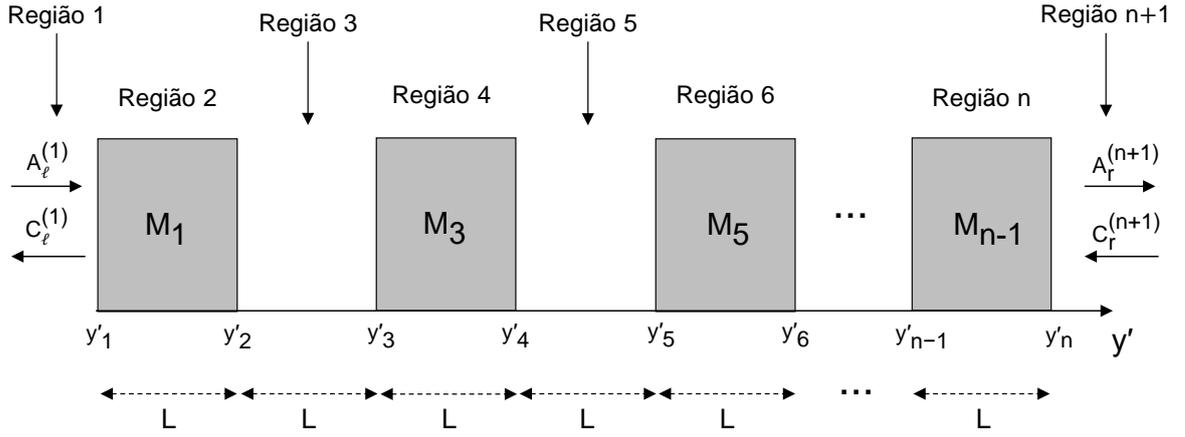


Figura 3.5 – Esquema para o problema de múltiplas barreiras magnéticas. As regiões acinzentadas, todas de mesmo comprimento  $L$ , representam as região de atuação do campo magnético. Além disso, estamos supondo, por simplicidade, que tais regiões estão equiespaçadas do mesmo comprimento  $L$ .

Considerando um problema de  $n$  interfaces (portanto,  $\frac{n}{2}$  regiões de campo magnético), localizadas nas posições  $y'_n = nL$ , com  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , teremos então  $\frac{n}{2}$  matrizes de transferência. Assim, a matriz de transferência  $\mathbf{M}$  que associa as amplitudes da região  $n + 1$  ( $A_r^{(n+1)}$  e  $C_r^{(n+1)}$ ), após a  $n$ -ésima interface, com as amplitudes da região 1 ( $A_l^1$  e  $C_l^1$ ), é obtida através do produtório de todas as matrizes de transferência, isto é

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_3 \mathbf{M}_5 \dots \mathbf{M}_{n-1} = \prod_{j=1,3,5}^{n-1} \mathbf{M}_j, \quad (3.119)$$

onde

$$\mathbf{M}_j = \frac{\phi_3^{(j)}}{2 \left( \phi_1^{(j)} \phi_5^{(j)} - \phi_2^{(j)} \phi_4^{(j)} \right)} \begin{pmatrix} \phi_5^{(j)} - \phi_4^{(j)} & -\phi_5^{(j)} - \phi_4^{(j)} \\ -\phi_2^{(j)} + \phi_1^{(j)} & \phi_2^{(j)} + \phi_1^{(j)} \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

e

$$\phi_1^{(j)} = \left( \tilde{\Gamma}_2^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_1^{jL} - \tilde{\Gamma}_1^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_2^{jL} \right) e^{ik_3'^{j+} jL} + \left( \tilde{\Gamma}_1^{(j-1)L} \Gamma_2^{jL} - \tilde{\Gamma}_2^{(j-1)L} \Gamma_1^{jL} \right) ik_3'^{j+} e^{ik_3'^{j+} jL}, \quad (3.121)$$

$$\phi_2^{(j)} = \left( \Gamma_1^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_2^{jL} - \Gamma_2^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_1^{jL} \right) ik_1'^{j-} e^{ik_3'^{j+} jL} + \left( \Gamma_1^{(j-1)L} \Gamma_2^{jL} - \Gamma_2^{(j-1)L} \Gamma_1^{jL} \right) k_1'^{j-} k_3'^{j+} e^{ik_3'^{j+} jL}, \quad (3.122)$$

$$\phi_3^{(j)} = i \left( k_1'^{j+} - k_1'^{j-} \right) \left( \tilde{\Gamma}_1^{jL} \Gamma_2^{jL} - \Gamma_1^{jL} \tilde{\Gamma}_2^{jL} \right), \quad (3.123)$$

$$\phi_4^{(j)} = \left( \tilde{\Gamma}_2^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_1^{jL} - \tilde{\Gamma}_1^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_2^{jL} \right) e^{ik_3'^{j-} jL} + \left( \tilde{\Gamma}_1^{(j-1)L} \Gamma_2^{jL} - \tilde{\Gamma}_2^{(j-1)L} \Gamma_1^{jL} \right) ik_3'^{j-} e^{ik_3'^{j-} jL}, \quad (3.124)$$

$$\phi_5^{(j)} = \left( \Gamma_1^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_2^{jL} - \Gamma_2^{(j-1)L} \tilde{\Gamma}_1^{jL} \right) ik_1'^{j-} e^{ik_3'^{j-} jL} + \left( \Gamma_1^{(j-1)L} \Gamma_2^{jL} - \Gamma_2^{(j-1)L} \Gamma_1^{jL} \right) k_1'^{j-} k_3'^{j-} e^{ik_3'^{j-} jL}. \quad (3.125)$$

Além disso, definimos também

$$\kappa_1^{(j)} = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \frac{\mu_y^2}{m_x m_y} \left[ k'_x + \frac{eB}{\hbar} (j-1)L \right]^2}, \quad (3.126)$$

e

$$\kappa_3^{(j)} = \sqrt{\frac{2\mu_y E}{\hbar^2} - \frac{\mu_y^2}{m_x m_y} \left[ k'_x + \frac{eB}{\hbar} jL \right]^2}. \quad (3.127)$$

Neste capítulo, analisaremos os resultados obtidos numericamente para as expressões encontradas no Capítulo 3. É importante ressaltar que todos os resultados que aqui se encontram foram obtidos considerando o caso de incidência normal do elétron na barreira.

## 4.1 Transmissão em função da energia de Fermi e do campo magnético aplicado

O gráfico abaixo, obtido a partir do tratamento numérico da Eq. (3.116) para  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm, mostra a probabilidade de transmissão  $T$ , considerando uma incidência normal, em função de dois parâmetros: a intensidade do campo magnético aplicado (dentro do intervalo de  $0 < B < 30$ T) e a energia de Fermi ( $0 < E_F < 0,5$  eV).

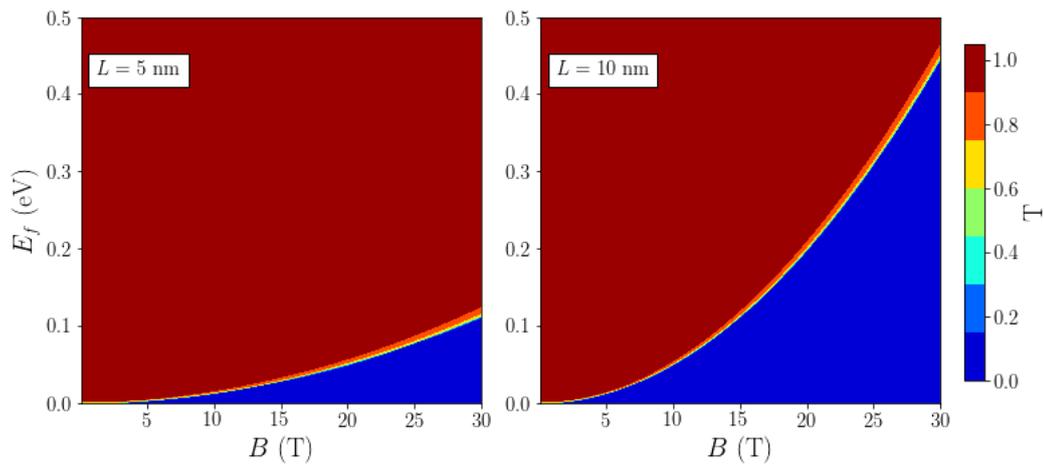


Figura 4.1 – Gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia de Fermi e da intensidade do campo magnético, para  $\theta = 0$  (barreira disposta ao longo da direção *zigzag*) e duas larguras de barreira:  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm.

Pode-se constatar que para valores maiores de  $B$  a energia de Fermi requerida para com que haja transmissão aumenta, o que é esperado mesmo classicamente.

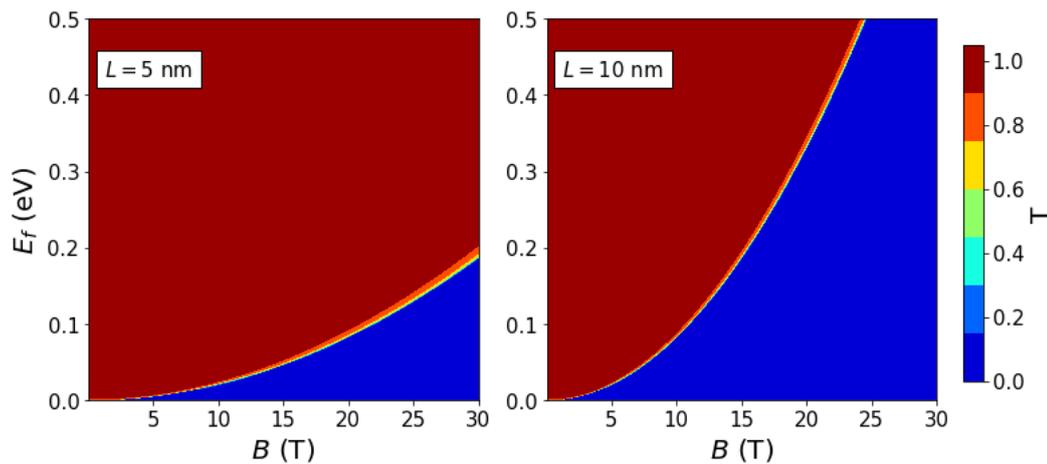


Figura 4.2 – Gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia de Fermi e da intensidade do campo magnético, para  $\theta = \pi/4$  e duas larguras de barreira:  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm.

O gráfico presente na Figura 4.2 foi obtido de modo similar ao da Figura 4.1, contudo, mudando a direção da barreira, que agora encontra-se rotacionada de  $\theta = \pi/4$  em relação ao caso anterior. Vemos que a probabilidade de transmissão foi afetada o que está relacionado com a anisotropia do material, conforme veremos a seguir.

## 4.2 Transmissão em função do número de camadas

A Figura 4.3 (a) mostra o gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia de Fermi ( $0 < E_F < 0,5$  eV) e do número de camadas ( $N = 1, 2, 3, 4$  e  $5$ ). Neste plot foram matidos fixos a largura da barreira, em  $L = 5$  nm, e o campo magnético em  $B = 15$  T. É possível notar que o número  $N$  de camadas não influencia na energia incidente crítica. Isso tem haver com o fato de o potencial vetor não depender de  $N$ , o que faz com que o transporte não seja alterado somente com o aumento (ou diminuição) do número de camadas. A Figura 4.3 (b), é semelhante a Figura 4.3 (a) mas com  $L = 10$  nm. Podemos notar que o aumento da largura da barreira acarreta em diferentes energias incidentes críticas para diferentes números de camada. As Figuras 4.3 (c) e (d) mostram de que maneira a transmissão varia com a intensidade do campo magnético (mantendo-se fixo a largura da barreira e a energia incidente). É nótório que para campos pouco intensos,  $B < 10$  T, a probabilidade de transmissão é igual a um. Contudo, um aumento na intensidade do campo mangético faz com que a transmissão reduza abruptamente para zero.

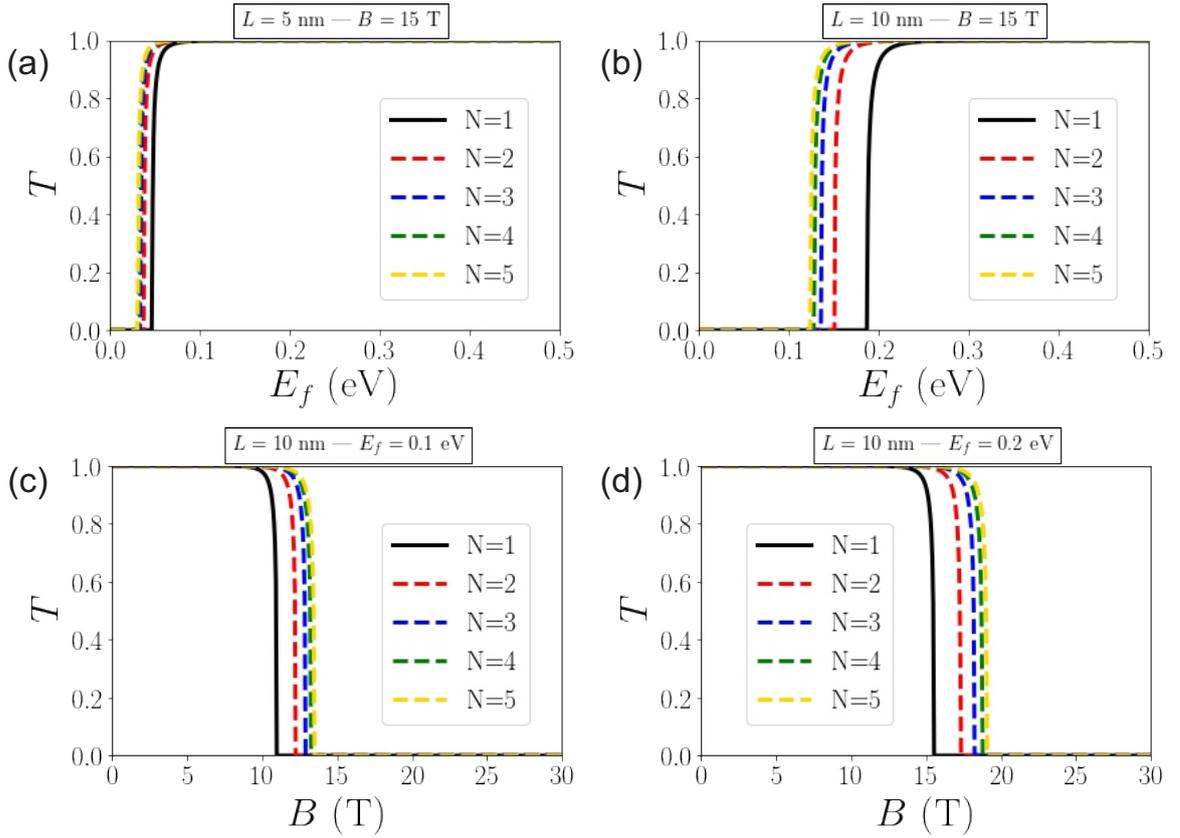


Figura 4.3 – Em (a) e (b), temos o gráfico da probabilidade de transmissão  $T$  em função da energia para diferentes números de camadas ( $N = 1, 2, 3, 4$  e  $5$ ), com  $L = 5$  nm e  $L = 10$  nm, respectivamente. Em (c) e (d), temos o gráfico de  $T$  em função de  $B$  para  $L = 10$  nm e  $E_F = 0,1$  eV e  $E_F = 0,2$  eV, respectivamente.

### 4.3 Influência da anisotropia na transmissão

Os gráficos polares da Figura 4.4 mostram a influência da anisotropia do material na probabilidade de transmissão. Em (a) observamos como a probabilidade de transmissão diminui com o aumento da intensidade do campo magnético aplicado e como ela se altera com a mudança do ângulo  $\theta$  de disposição da barreira. Para  $\theta = 0$ , por exemplo, a barreira encontra-se paralela ao eixo  $x$  (direção *zigzag*) e a transmissão ocorre ao longo da direção  $y$  (*armchair*), nessa situação o campo magnético crítico para que não ocorra mais transmissão é da ordem de 20 T. Por outro lado, para  $\theta = \pi/2$ , quando a barreira está disposta ao longo da direção *armchair*, o campo crítico reduz para valores próximo de 10 T. Assim, vemos claramente que a transmissão é fortemente influenciada pela orientação da barreira magnética, sendo favorecida quando a barreira está disposta paralelamente a direção *zigzag*.

Na Figura 4.4 (b), temos um gráfico polar da probabilidade de transmissão em função da energia incidente e do ângulo  $\theta$ . É notório mais uma vez a influência da anisotropia do sistema na transmissão. Mantendo os outros parâmetros constantes, vemos que para

$\theta = 0$ , a energia incidente crítica é consideravelmente menor do que para o caso  $\theta = \pi/2$ . Esse resultado mostra, novamente, que a transmissão é favorecida quando a barreira está disposta paralelamente a direção *zigzag*.

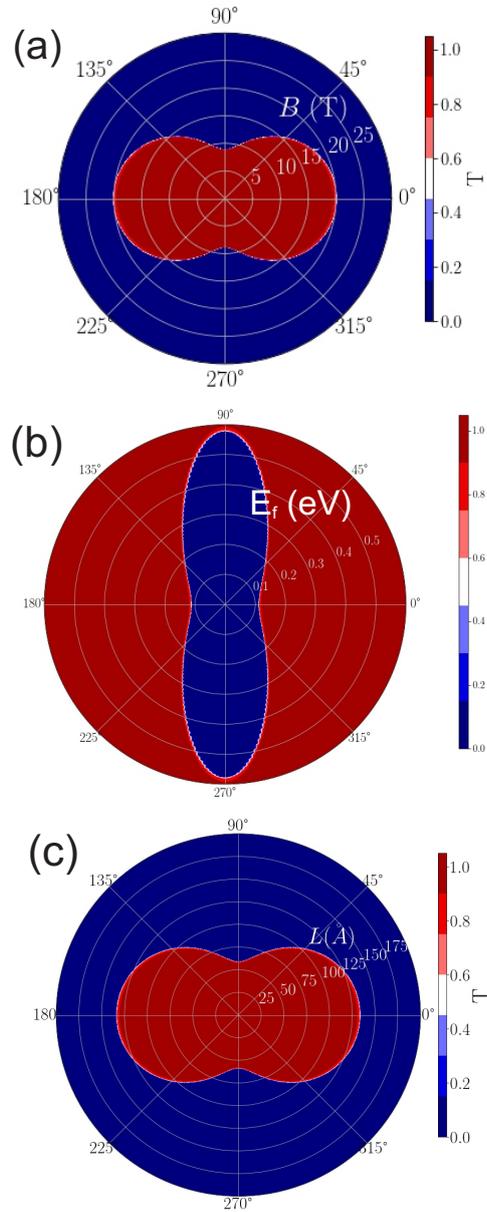


Figura 4.4 – Os gráficos acima mostram a probabilidade de transmissão  $T$  em função do ângulo  $\theta$  de disposição da barreira e (a) do campo magnético, (b) da energia de Fermi e (c) da largura da barreira.

Por fim, para o gráfico da Figura 4.4 (c), temos a probabilidade de transmissão em função da largura da barreira e do ângulo  $\theta$ . Neste caso, vemos que a largura crítica que faz com que a transmissão reduza abruptamente para zero é bem maior quando a barreira encontra-se paralela a direção *zigzag* do que quando paralela a direção *armchair*.

No Capítulo 1, apresentamos um resumo teórico sobre o objeto de estudo deste trabalho: o fosforeno, tecendo comentários sobre o processo de obtenção experimental deste material e de algumas de suas propriedades físicas.

No Capítulo 2 obtivemos, através do modelo *tight-binding*, a relação de dispersão do fosforeno que resulta em um modelo de quatro bandas: duas de baixa energias (próximas ao nível de Fermi) e duas de energia mais alta. Logo após, dentro do regime de duas bandas (onde consideramos apenas as duas bandas com energia mais próximas ao *gap*), desenvolvemos o modelo contínuo e, em seguida, o modelo de massa efetiva para o fosforeno. Tais modelos, mesmo tratando-se de sucessivas aproximações, reproduzem com boa precisão as propriedades eletrônicas de uma monocamada de fósforo negro no regime de baixas energias.

No Capítulo 3, calculamos os autoestados do Hamiltoniano, dentro da aproximação de massa efetiva, com quebra de simetria de translação ao longo de uma das direções considerando ou não a presença de um campo magnético uniforme no sistema. Em seguida, utilizando o método da matriz de transferência, calculamos as probabilidades de transmissão e reflexão.

Por fim, no Capítulo 4, observamos que as propriedades de transporte são fortemente influenciadas pela anisotropia do material, sendo a probabilidade de transmissão favorecida quando a barreira está disposta paralelamente a direção *zigzag*, para o caso de incidência normal. Além disso, apresentamos resultados das probabilidades de transmissão para diferentes orientações da barreira (Figura 4.4) e para diferentes números de camadas (Figura 4.3).

## Substituição de Peierls e a liberdade de *gauge*

Na mecânica clássica, um elétron, de massa  $m$  e carga  $q = -e$ , movendo-se sob a influência de um campo magnético uniforme tem sua dinâmica regida pela segunda lei de Newton, neste caso, dada por

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (\text{A.1})$$

da qual concluímos que o elétron realiza uma trajetória que pode ser circular ou helicoidal, dependendo do ângulo entre o vetor velocidade  $\mathbf{v}$  e o vetor campo magnético  $\mathbf{B}$ ; lembrando que a força magnética atua como resultante centrípeta no presente problema. Entretanto, em ambas as trajetórias, o movimento possui uma mesma frequência ciclotrônica dada por  $\omega_c = eB/m = \hbar/m\ell_B^2$ , onde a constante  $\ell_B = \sqrt{\hbar/eB}$  é denominada de *comprimento magnético*. É de costume definir essa constante em problemas que envolvem campos magnéticos pois o seu valor, que depende do campo aplicado, define a escala de comprimento no problema [24].

Por outro lado, na mecânica quântica, a dinâmica é regida pela equação de Schrödinger:  $H\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$ . Para o referido sistema, a presença do campo magnético pode ser incluída no Hamiltoniano, assim como na mecânica clássica, através do *acoplamento mínimo* (ou substituição de Peierls), dado por:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + q\mathbf{A} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}, \quad (\text{A.2})$$

onde  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor que obedece a relação:  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Entranto, um potencial vetor não define univocamente o campo magnético  $\mathbf{B}$ , isto é, diferentes potenciais vetores podem gerar o mesmo campo magnético. Desse modo, decorre que essa teoria possui uma liberdade de escolha para o vetor  $\mathbf{A}$ <sup>1</sup> (ou liberdade de *gauge*), desde que tal escolha resulte no mesmo campo magnético.

Neste trabalho, por simplicidade, consideraremos apenas campos magnéticos uniformes. Além disso, tais campos estarão dispostos perpendicularmente ao sistema, que se encontra no plano  $xy$ , de tal modo que podemos escrever:  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ , com  $B$  sendo uma constante. Entretanto, conforme mencionado, existem diferentes calibres que resultam

<sup>1</sup>A liberdade é, mais precisamente, no divergente do vetor  $\mathbf{A}$ .

no mesmo campo  $\mathbf{B}$ ; dentre eles, os mais comuns são o calibre simétrico e o calibre de Landau. No calibre simétrico, o potencial vetor é dado por

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (\text{A.3})$$

enquanto no calibre de Landau temos

$$\mathbf{A} = Bx\hat{y} \quad (\text{A.4})$$

ou

$$\mathbf{A} = -By\hat{x}. \quad (\text{A.5})$$

dependendo do que será mais conveniente ao problema a ser resolvido.

## Referências Bibliográficas

- [1] RESNICK, R.; EISBERG, R. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Rio de Janeiro: Campus, 1994
- [2] K. S. Novoselov; A. K. Geim; S. V. Morozov; D. Jiang; Y. Zhang; S. V. Dubonos; I. V. Grigorieva e A. A. Firsov. *Electric field effect in atomically thin carbon films*. Science **306**, 666 (2004).
- [3] R. Saito; G. Dresselhaus; M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, Londres (1998).
- [4] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, Cambridge (2012).
- [5] C. A. Dartora; Miguel J. Saldaña Jimenez; Fernando Zanella, *Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em (1+2)-D e o grafeno*, Rev. Bras. Ensino Fís. **37**, n. 3, 3301 (2015).
- [6] Zhang, Y.; Tan, Y. W.; Stormer, H. L.; Kim, P. *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*, Nature, London, v. 438, n. 7065, 2005.
- [7] Rusin, T. M.; Zawadzki, W. *Zitterbewegung of electrons in graphene in a magnetic field*, Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, v. 78, n. 12, 2008.
- [8] Zawadzki, W.; Rusin, T. M. *Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review*, Journal of physics. Condensed matter: an Institute of Physics journal, v. 23, n. 14, 2011.
- [9] Katsnelson, M. I.; Novoselov, K. S.; Geim, A. K. *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*, Nature Physics, v. 2, n. September, 2006.

- [10] Pereira, J. M.; Peeters, F. M.; Chaves, A.; Farias, G. A. *Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene*. Semiconductor Science and Technology, v. 25, n. 3, 2010.
- [11] Chaves, A.; Da Costa, D. R.; De Sousa, G. O.; Pereira, J. M.; Farias, G. A. *Energy shift and conduction-to-valence band transition mediated by a time-dependent potential barrier in graphene*. Phys. Rev. B **92**, n. 12, 2015.
- [12] Peierls, R. *Quelques propriétés typiques des corps solides*. Annales de l' I.H.P., v. 5, n. 3, 1935.
- [13] Landau, L. *Zur Theorie der Phasenumwandlungen II*. Physik. Z. Sowjetm v. 11, 1937.
- [14] G. O. de Sousa, *Anéis e pontos quânticos de fósforo negro investigadas por modelo contínuo*, Dissertação de mestrado, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2016.
- [15] Descobrir La Química El fósforo. Disponível em: <<https://descubrilaquimica.wordpress.com/2013/12/31/el-fosforo/>>. Acesso em: 5 de Junho de 2018.
- [16] Hultgren, R.; Gingrich, N. S; Warren, B. E. *The atomic distribution in Red and Black Phosphorus and the Crystal Structure of Black Phosphorus*. The Journal of Chemical Physics, v. 3, n. 6, 1935.
- [17] A. Carvalho, M. Wang, X. Zhu, A. S. Rodin, H. Su e A. H. Castro Neto. *Phosphorene: from theory to applications*. Nature Reviews Materials **1**, 16061 (2012)
- [18] H. O. H. Churchill e P. J. Herrero. *Two-dimensional crystals: Phosphorus joins the family*. Nature Nanotech. **9**, 330-331 (2014).
- [19] J. Qiao, X. Kong, Z. Hu, F. Yang e W. Ji. *High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus*. Nature communications **5**, 5475 (2014).
- [20] M. Ezawa. *Topological origin of quasi-flat edge band in phosphorene*. New Journal of Physics **16**, 115004 (2014).
- [21] Andrey Chaves, *Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores*. Tese de doutorado, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2010.
- [22] Pereira, J. M. e Katsnelson, M. I. *Landau levels of single layer and bilayer phosphorene*. Phys. Rev. B **92**, 075437 (2015).

- [23] D. J. P. de Sousa, L. V. de Castro, D. R. da Costa and J. M. Pereira Jr. *Boundary conditions for phosphorene nanoribbons in the continuum approach*. Phys. Rev. B **94**, 235415 (2016).
- [24] Felix, L. C. *Níveis de Landau em grafeno na presença de potenciais unidimensionais*. Monografia de bacharelado, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza (2017).
- [25] "Parabolic Cylinder Differential Equation" Wolfram Alpha. Acessado em: 14 Fev 2018. Url: <http://mathworld.wolfram.com/ParabolicCylinderDifferentialEquation.html>
- [26] D. J. P. de Sousa, L. V. de Castro, D. R. da Costa, D. R. da Costa, J. M. Pereira Jr., and Tony Low, Phys. Rev. B **96**, 155427 (2017).
- [27] D. J. P. de Sousa, L. V. de Castro, D. R. da Costa, J. M. Pereira Jr e Tony Low. *Multilayers black phosphorus: from tight-binding to continuum description*. Phys. Rev. B **94**, 235415 (2016).
- [28] "Parabolic cylinder function" Wikipedia. Acessado em: 28 Nov 2019. Url: <https://en.wikipedia.org/wiki/Paraboliccylinderfunction.html>
- [29] X. Y. Zhou, R. Zhang, J. P. Sun, Y. L. Zou, D. Zhang, W. K. Loum F. Cheng, G. H. Zhou, F. Zhai, and K. Cang, Sci. Rep. **5**, 12295 (2015).
- [30] M. Ezawa, New J. Phys. **16**, 115004 (2014).
- [31] M. M. Grujić, M. Ezawa, M. Z. Tadić, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **93**, 245413 (2016).
- [32] A. Altland e B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Second Edition. Cambridge University Press, New York (2010).
- [33] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **89**, 201408 (2014).
- [34] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománck, and P. D. Ye, ACS Nano **8**, 4033 (2014).
- [35] Duarte José Pereira de Sousa, *Propriedades eletrônicas do fosforeno*. Tese de doutorado, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2018.