

UFF- UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

RAFAEL FERREIRA PINTO DO RÊGO BARROS

Ressonâncias Fano na transmissão eletrônica de sistemas
híbridos

Rio de janeiro

2015

UFF- UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

RAFAEL FERREIRA PINTO DO RÊGO BARROS

RESSONÂNCIAS FANO NA TRANSMISSÃO
ELETRÔNICA DE SISTEMAS HÍBRIDOS

Trabalho de Conclusão de
Curso apresentado à
Universidade Federal
Fluminense como requisito
parcial para a obtenção do grau
Bacharel em Física

ORIENTADORA: Prof.^a Dr.^a Andrea Brito Latgé

Rio de Janeiro

2015

Agradecimentos

À Prof.^a Andrea Brito Latgé

Aos Professores Kaled Dechoum, Roberto Bechara Muniz e Daiara
Fernandes Faria

À FAPERJ

RESUMO

Este trabalho teve como objetivo o estudo e análise do efeito Fano no transporte eletrônico de sistemas híbridos. Usando o método Tight-Binding, calculamos as propriedades de transporte de alguns sistemas nanoatômicos simples, investigando, assim, o mecanismo envolvido no surgimento do efeito Fano neste contexto. A relevância desta análise reside no grande número de aplicações possíveis, as quais abrangem diversas áreas da física, tais como a óptica, física nuclear, física da matéria condensada e etc. Algumas destas aplicações potenciais foram estudadas em detalhes e outras foram deixadas como possibilidades para futuras pesquisas.

Palavras-chave: Fano, ressonâncias, Tight-Binding, aplicações tecnológicas

ABSTRACT

This work was made with the purpose of studying the Fano effect in the electronic transport properties of hybrid systems. Using the Tight-Binding approximation, we calculated the transport properties of some simple nanosystems, investigating the mechanism involved in the manifestation of Fano resonances in this context. The relevance of the study lies in the fact that there is a big amount of applications related to it, involving several areas of physics, such as optics, nuclear physics, condensed matter physics and etc. Some of these potential applications have been studied in details and others have been left as possibilities to future research.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO.....	6
1.1 RESSONÂNCIAS FANO.....	7
1.2 MOTIVAÇÃO.....	8
1.2.1 Microcavidades ópticas e detecção de nanopartículas.....	9
1.2.2 Reações ressonantes em física nuclear.....	10
1.2.3 Interferômetro Mach-Zender-Fano.....	12
2 DESENVOLVIMENTO.....	14
2.1 PROCESSOS DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO.....	14
2.2 MÉTODO TIGHT-BINDING.....	16
2.2.1 Formalismo.....	17
2.2.2 Aproximação de banda única: exemplo.....	19
2.3 CÁLCULO DA TRANSMISSÃO COM A APROXIMAÇÃO TIGHT BINDING.....	21
2.4 TRANSMISSÃO POR DEFEITOS COMPLEXOS.....	23
2.4.1 Cadeia Finita.....	24
2.4.1.1 Coeficiente de transmissão.....	27
2.4.2 Anel quântico.....	29
3 Conclusões.....	32
4 Referências bibliográficas.....	34

1 INTRODUÇÃO

O espalhamento da radiação pela matéria é uma importante ferramenta para estudar propriedades de diferentes sistemas físicos. Um exemplo importante é o do espalhamento de radiação eletromagnética por um átomo, que, entre outras coisas, nos fornece o espectro de energia do mesmo. De modo geral, o espalhamento de ondas envolve a propagação por diferentes trajetórias, resultando, conseqüentemente, no fenômeno de interferência (Miroshnichenko *et al*, 2010, p. 2257).

Com o desenvolvimento da mecânica quântica e, intrinsecamente, da interpretação ondulatória da matéria, o fenômeno de interferência e suas conseqüências puderam ser estudados em diversos tipos de sistema, envolvendo não só radiação eletromagnética em geral, mas também a própria matéria. O espalhamento de Raios X por uma amostra sólida, por exemplo, nos fornece informação sobre a estrutura cristalina do material (difração de Bragg), assim como o espalhamento de nêutrons nos fornece informação sobre o espectro de fônons desta amostra.

Neste trabalho, tratamos de diferentes casos nos quais ocorre interferência entre ondas que se propagam em trajetórias de diferentes tipos: uma com um contínuo de modos de propagação e outra com modos quantizados. O estudo do transporte neste tipo de arranjo dá origem a ressonâncias e antirressonâncias, das quais se pode obter informações sobre os modos quantizados supracitados. A estas ressonâncias e anti-ressonâncias, se dá o nome genérico de ressonâncias Fano.

1.1 RESSONÂNCIAS FANO

Segundo Miroshnichenko *et al* (2010, p. 2258), “Beutler (1935) observou que algumas das linhas espectrais de Rydberg exibiam perfil assimétrico bem pronunciado na absorção. Foi Hugo fano(1935) quem sugeriu a primeira explicação teórica para este efeito”. Para ele:

A interpretação dada por Fano para esses perfis estranhos das linhas espectrais de absorção é baseada na interação entre um estado excitado discreto de um átomo com um contínuo compartilhando o mesmo nível de energia, que resulta no fenômeno de interferência

Na tentativa de explicar este comportamento no espectro de absorção de gases nobres (1935 *apud* FANO; Miroshnichenko *et al* 2010), Hugo Fano propôs que o mesmo se devia à interferência da luz simplesmente espalhada com a luz espalhada através do processo de auto-ionização. Enquanto o simples espalhamento pode acontecer para um contínuo de energias, o processo de auto-ionização é discreto, e, portanto, os pré-requisitos para a ocorrência de ressonâncias Fano são satisfeitos. A expressão obtida por Fano para a seção de choque de espalhamento foi:

$$\sigma = \frac{(\epsilon - q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (1)$$

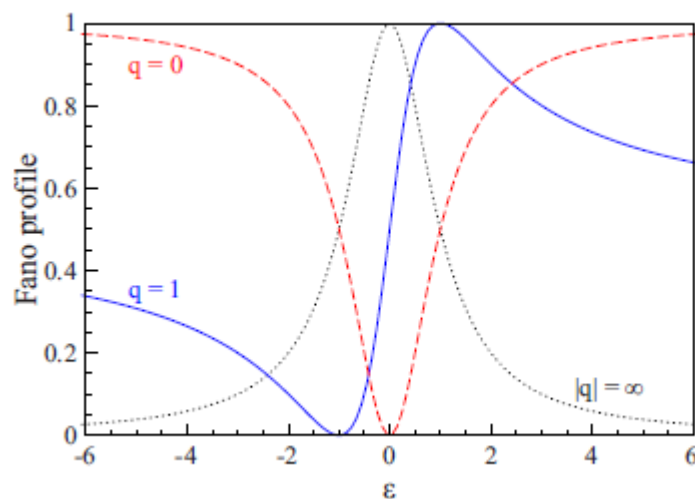


Figura 1: Curvas da seção de choque de espalhamento dadas pela eq. (1) em função da energia reduzida.

onde ϵ é a energia reduzida do sistema e q , muitas vezes chamado de parâmetro Fano, é um parâmetro que está relacionado com a assimetria observada nos perfis. Quando $q = 0$, obtemos

$$\sigma = \frac{\epsilon^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (2)$$

que é a expressão de uma ressonância de perfil simétrico. Para valores maiores de $|q|$, o perfil assimétrico se torna cada vez mais pronunciado, como mostra a Figura 1 (Miroshnichenko *et al*, 2010, p.2260).

Podemos, portanto, enfatizar que não é o perfil assimétrico de uma ressonância que a caracteriza como uma ressonância Fano, já que existe a possibilidade de o parâmetro q ser nulo. A supressão da transmissão (seção de choque, neste caso), por outro lado, independe do parâmetro de assimetria, e, portanto, é o fator que usamos como indicador de uma ressonância Fano.

1.2 MOTIVAÇÃO

Como se trata de um fenômeno de interferência, o efeito Fano encontra muitas aplicações e utilidades em diversas áreas da física. Nesta seção, mostramos algumas ocasiões nas quais o efeito Fano se manifesta, com o objetivo de demonstrar a abrangência dos conceitos estudados nesta monografia e também de apresentar a motivação desta pesquisa.

1.2.1 Microcavidades ópticas e detecção de nanopartículas.

O estudo da propagação de luz em dispositivos fotônicos tem se mostrado muito frutífero, dando origem a diversas aplicações tecnológicas. Um dispositivo fotônico que se destaca por sua função é apresentado na Figura 2.

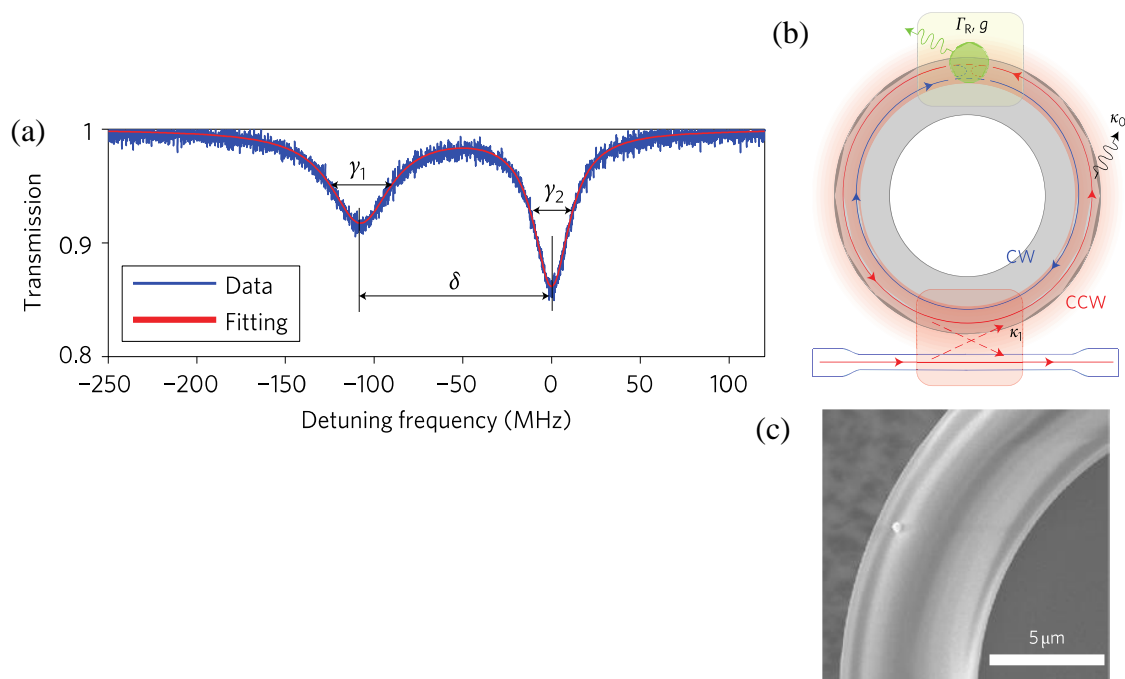


Figura 2: Detecção de uma nanopartícula com uma microcavidade óptica. (a) mostra a transmissão e (b) e (c) mostram figuras ilustrativa e real, respectivamente, de uma microcavidade com uma nanopartícula em sua superfície.

Neste dispositivo, a presença de uma nanopartícula na superfície da microcavidade provoca uma quebra de degenerescência dos seus dois modos de propagação. Esta quebra de degenerescência pode ser detectada ao se estudar a transmissão em uma guia de onda infinita acoplada via onda evanescente com a microcavidade. Como a guia de onda infinita possui um contínuo de modos de propagação, o efeito Fano se faz presente, e a transmissão é suprimida quando a frequência da luz incidente atinge uma das duas frequências naturais (agora diferentes) da microcavidade. A distância em frequência dos modos naturais da cavidade com

a nanopartícula em sua superfície pode, ainda, fornecer o tamanho desta nanopartícula, bem como a sua massa (Jiangang Zhu *et al*, 2010).

1.2.2 Reações resonantes em física nuclear

Quando dois núcleos colidem, a colisão pode ser elástica ou inelástica. A colisão elástica, ou espalhamento elástico, é quando os dois núcleos são os mesmos antes e depois da colisão, de modo que toda a energia cinética é conservada. A colisão ou espalhamento inelástico, por sua vez, pode ocorrer de diversas maneiras diferentes, dando origem a diferentes reações nucleares.

As reações envolvidas no espalhamento inelástico podem ser divididas em dois tipos: reações diretas e reações de núcleo composto. As reações diretas ocorrem quando a energia do núcleo incidente é alta (maior que 10 MeV), e o seu comprimento de onda de De Broglie é pequeno. Nesta situação o núcleo incidente interage apenas com alguns nucleons na superfície do núcleo alvo e, portanto, pode levar estes nucleons a estados excitados de partícula única. Sendo assim, podemos dizer que as reações diretas são processos discretos, pois os estados de partícula única também o são.

As reações de núcleo composto, por sua vez, ocorrem quando a energia do núcleo incidente é menor, de modo que ele interaja com o núcleo alvo como um todo. Como o nome indica, uma reação de núcleo composto é um processo de duas etapas, isto é, os núcleos colidem, formando um núcleo composto, e depois este núcleo composto decai. Vale ressaltar que os estados de núcleo composto que podem ser formados são tantos, e são tão próximos em energia, que é usual considerar que eles formam um espectro contínuo.

Entre estes dois extremos existem as reações ressonantes: estados discretos na região de energia de núcleo composto. Um fato interessante, como mostra a figura 3, se observa ao medir-se a seção de choque de espalhamento elástico em função da energia, para energias na região das reações ressonantes.

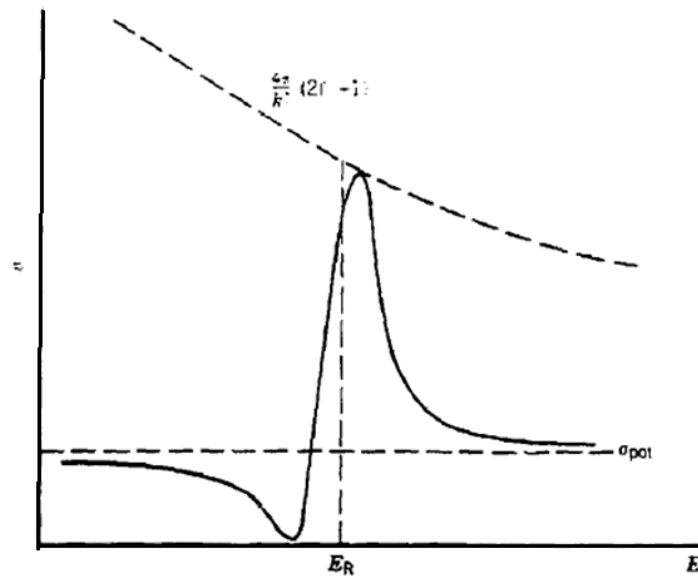


Figura 3: Representação da interferência entre o espalhamento ressonante e o espalhamento potencial dando origem ao efeito Fano na seção de choque de espalhamento elástico (Krane, 1987, p.428).

Este comportamento deve-se à interferência entre o espalhamento ressonante, ou reação ressonante, que envolve a formação de um estado quase-ligado, e o espalhamento potencial, que é o espalhamento do núcleo incidente pelo potencial nuclear. Note que, como mencionado, o espalhamento ressonante é um processo discreto, enquanto o espalhamento potencial não o é. A interferência entre esses dois processos, como era de se esperar, dá origem ao efeito Fano. A semelhança entre as Figuras 1 e 3 é clara.

1.2.3 Interferômetro Mach-Zender-Fano

No contexto de nanoestruturas, um sistema bastante interessante é o interferômetro Mach-Zender-Fano (MZFI). De modo geral, um interferômetro Mach-Zender (MZI), como mostrado na Figura 4(a), é composto de duas trajetórias contínuas, isto é, que não possuem modos de propagação discretos. Cálculos do coeficiente de transmissão eletrônica considerando

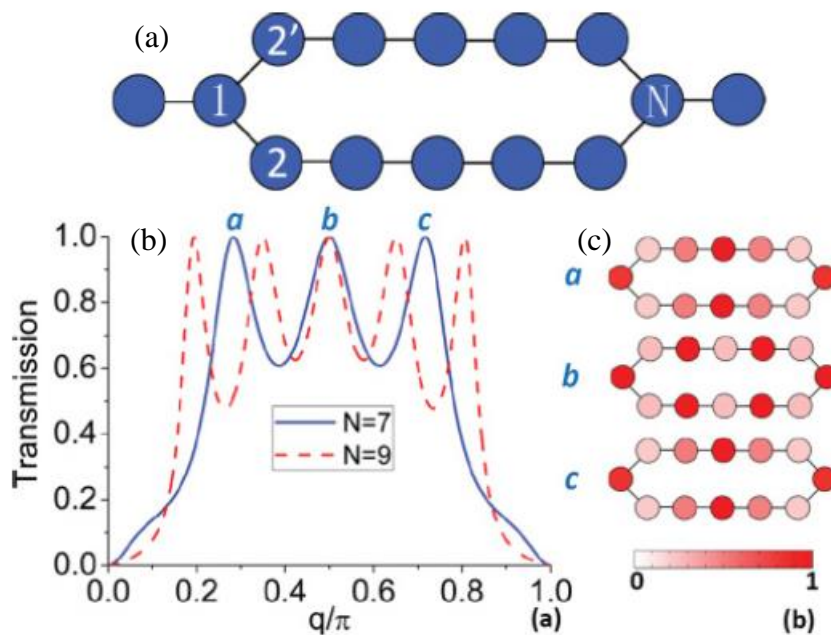


Figura 4: Comparação das propriedades de espalhamentos de dois MZI, um com $N=7$ e outro com $N=9$: (a) Ilustração de um MZFI (b) transmissão em função do vetor de onda q e (c) perfil de intensidade para frequências nas quais a transmissão é perfeita (para $N=7$).

diferentes números de átomos nos braços do interferômetro, dado por N na Figura 4(b), mostram que não existe supressão do transporte eletrônico. A Figura 4(c) apresenta resultados do perfil de intensidade da onda para frequências nas quais a transmissão eletrônica é perfeita no caso de $N=7$.

Recentemente, o interferômetro Mach-Zender-Fano foi proposto (Miroshnichenko *et al*, 2011) através do acoplamento de um defeito a um dos braços do MZI, que permite a manipulação mais versátil do espalhamento de ondas, devido à presença de múltiplos caminhos

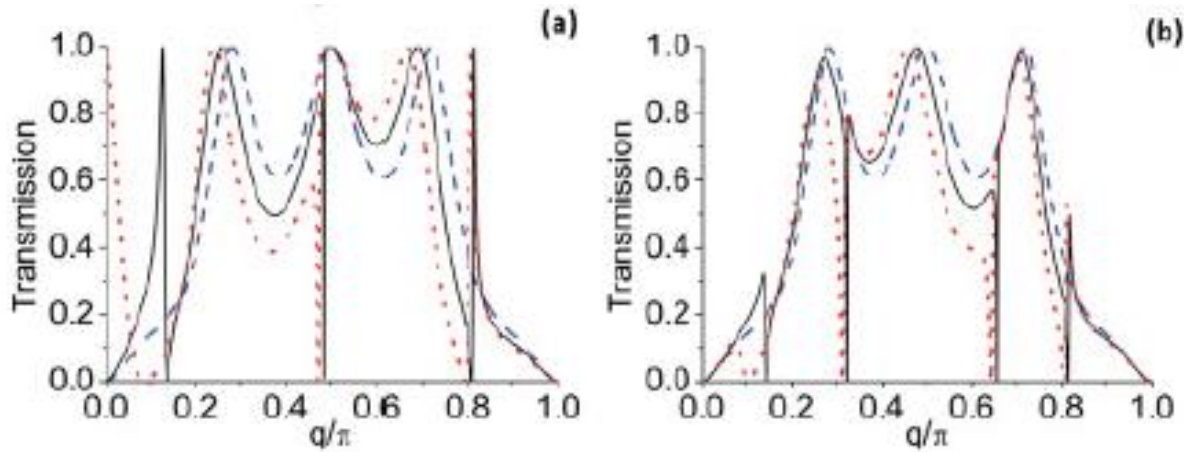


Figura 5: Transmissão de dois MZFI, um com o defeito localizado no sítio (a) $M=4$ e outro em (b) $M=3$. A linha preta e a linha vermelha mostram os resultados da transmissão quando a energia do sítio do defeito é $\epsilon = 0.5$ e $\epsilon = 1$, respectivamente. A linha azul mostra o resultado da transmissão de um MZI com $N=7$ para comparação.

de espalhamento. A Figura 5 mostra resultados do coeficiente de transmissão eletrônica para dois MZFI diferentes.

Note que a transmissão do MZI não apresenta ressonâncias Fano enquanto que no caso de um MZFI as ressonâncias Fano aparecem. Isto se deve ao fato de o defeito dar origem a modos localizados discretos, de modo que os requisitos para a ocorrência de ressonâncias Fano são satisfeitos. Os MZFI se destacam pelo fato de tornarem possível a manipulação das ressonâncias Fano. Esta propriedade é responsável pelo potencial que estes sistemas têm de serem usados em aplicações tecnológicas. No capítulo seguinte, vamos descrever o desenvolvimento teórico do estudo do efeito Fano em nanoestruturas eletrônicas, tema central desta monografia.

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 PROCESSOS DE TRANSMISSÃO E DE REFLEXÃO

Nesta seção, mostramos como é feito o cálculo da probabilidade de transmissão em sistemas quânticos. Para isto, usamos o problema mais simples possível: o de uma barreira de potencial do tipo Delta de Dirac.

$$V(x) = a\delta(x). \quad (3)$$

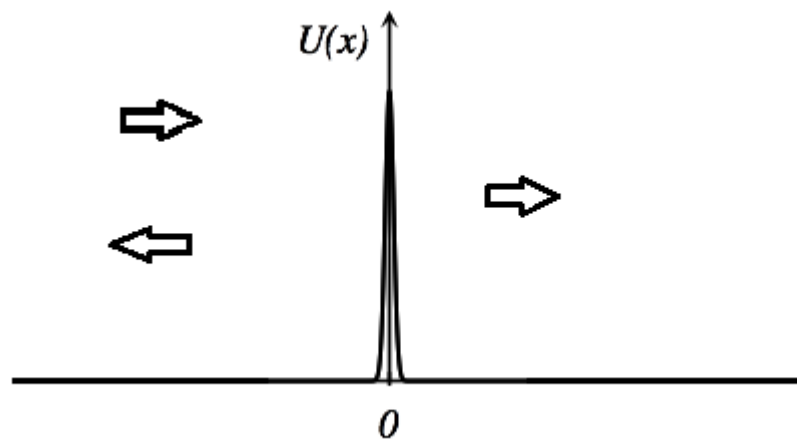


Figura 6: Ilustração dos processos de transmissão e reflexão de uma partícula por um potencial delta de Dirac.

A função de onda de uma partícula com energia E incidente, antes e depois do potencial, é a de uma partícula livre, que pode ser escrita como:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x < 0 \\ te^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (4)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ é o vetor de onda da partícula. Os coeficientes r e t são chamados de coeficientes de reflexão e de transmissão, respectivamente. Estes coeficientes são quantidades complexas e recebem estes nomes pois são as amplitudes da onda refletida e da onda transmitida pelo potencial. No entanto, as quantidades que podem ser verificadas experimentalmente não são as amplitudes mencionadas, mas sim as probabilidades de transmissão e de reflexão, que são dadas, respectivamente, por $T = |t|^2$ e $R = |r|^2$.

Usando em seguida as condições de contorno de continuidade da função de onda e da descontinuidade de sua derivada, obtêm-se as seguintes expressões para as probabilidades de transmissão e de reflexão (Griffiths, 2011, p.58):

$$R = \frac{1}{1 + \left(\frac{2\hbar^2 E}{ma^2}\right)}, \quad T = \frac{1}{1 + \left(\frac{ma^2}{2\hbar^2 E}\right)}, \quad (5)$$

onde, como esperado, $R+T=1$. O formalismo apresentado acima é frequentemente utilizado no estudo de propriedades de transporte de sistemas unidimensionais.

No tratamento de problemas mais complexos, como no espalhamento em duas e três dimensões, por exemplo, o formalismo utilizado é ligeiramente diferente. Nestes casos, a probabilidade de transmissão T dá lugar à amplitude de espalhamento $f(\theta)$, que está relacionada com a probabilidade de espalhamento numa dada direção. A essência do

formalismo, no entanto, permanece inalterada: uma onda incide num potencial dando origem a uma onda espalhada (Griffiths, 2011, p.295).

De modo geral, estamos interessados na interferência entre a onda espalhada e a onda não espalhada, ou entre ondas espalhadas por mecanismos diferentes, fenômeno este que pode dar origem a diferentes efeitos, como, por exemplo, o efeito Fano. Na seção seguinte, descreveremos um método amplamente utilizado no estudo de sistemas de matéria condensada, que também será usado nesta monografia para discutir o efeito Fano.

2.2 MÉTODO TIGHT-BINDING

O método Tight-binding, ou método de ligações fortes, é muito adequado para o tratamento de sistemas nos quais a sobreposição das funções de onda atômicas é pequena, de modo que a descrição atômica necessita de correções, mas não se torna irrelevante. Como veremos, a função de onda de um elétron em um sistema deste tipo pode ser escrita como uma combinação linear das funções de onda atômicas, ou orbitais atômicos. Apesar de sua simplicidade, o método Tight-Binding descreve com sucesso a estrutura eletrônica de diversos nanomateriais, como, por exemplo, os nanotubos de carbono e sistemas formados a base de carbono como as nanofitas de grafeno (Rocha, 1995, p.34).

2.2.1 Formalismo

No método Tight-Binding, o Hamiltoniano de um único elétron é descrito como

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}), \quad (6)$$

onde H_{at} é a Hamiltoniana atômica e $\Delta U(\mathbf{r})$ contém todas as correções ao potencial atômico necessárias para se produzir o potencial completo da rede. Por questão de simplicidade, analisaremos o caso no qual a correção $\Delta U(\mathbf{r})$ só se torna relevante a distâncias suficientes para que a função de onda atômica seja muito pequena. Nesse caso extremo, qualquer combinação linear de funções de onda atômicas será uma auto-função da Hamiltoniana completa, como se pode ver da eq. (6).

Em um arranjo de N átomos invariante sobre translação de um vetor \mathbf{R} , segundo o Teorema de Bloch, a função de onda eletrônica obedece à seguinte relação:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

onde \mathbf{k} pode ser qualquer um dos N vetores da rede recíproca associados ao arranjo atômico em questão, e que sejam consistentes com a condição de contorno de Born-Von Karman. Para que a descrição de Bloch permaneça válida, é necessário que as combinações lineares mencionadas sejam (Ashcroft e Mermim, 2011, p.193)

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (8)$$

Apesar de os resultados provenientes da simplificação acima serem triviais, dizendo apenas que as auto-energias são as próprias energias atômicas, a eq. (8) sugere que, em casos mais realistas, devemos procurar soluções que tenham a forma geral:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (9)$$

onde as funções ϕ estejam de alguma forma relacionadas com as funções de onda atômicas. De fato, qualquer função de Bloch pode ser expandida exatamente em termos das funções localizadas $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, que são chamadas de funções de Wannier (Ashcroft, 2011, p. 188). A aproximação Tight-Binding consiste justamente em propor que as funções de Wannier de um elétron fortemente ligado sejam combinações lineares de algumas funções de onda atômicas:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Por causa desta proposição sobre as funções de Wannier, o método Tight-Binding também é chamado de método LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*).

Em muitos casos, no entanto, o interesse está voltado para sistemas nos quais não há simetria completa de translação. A presença de uma impureza, por exemplo, quebra a simetria de translação da rede e, conseqüentemente, a descrição da função de onda de um elétron em termos das funções de Bloch deixa de ser possível. A descrição em termos das funções de Wannier, no entanto, ainda é possível, já que as mesmas formam um conjunto completo de funções ortogonais, e, conseqüentemente, uma base para o espaço das funções de onda. A expansão na eq. (9) pode então ser generalizada para:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} C(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (11)$$

A quantidade de orbitais atômicos nas combinações lineares que formam as funções de Wannier pode ser escolhida de acordo com o grau de precisão desejado. Por exemplo, em se tratando de materiais de carbono, é conveniente usar o orbital de valência s e os três orbitais p, enquanto que para os metais de transição, é mais apropriado o uso do orbital s e os 5 orbitais d,

e assim por diante. Vale ressaltar que para cada orbital utilizado na função de Wannier, obtém-se uma banda de energia diferente.

2.2.2 Aproximação de banda única: exemplo da cadeia linear

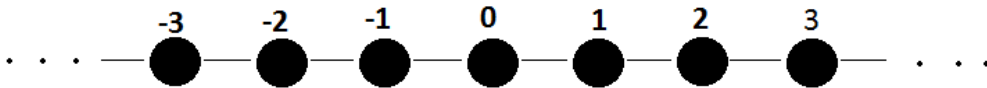


Figura 7: Cadeia linear infinita.

A maneira mais simples de usar a aproximação Tight-Binding, é considerando apenas um orbital atômico na expansão das funções de Wannier. Deste modo, obtém-se apenas uma banda de energia, o que simplifica os cálculos consideravelmente. Nesta seção, calculamos a banda de energia para um sistema simples, uma cadeia infinita com parâmetro de rede a , como mostrado na Figura 7, com o objetivo de exemplificar o procedimento geralmente utilizado. Alguns dos resultados obtidos nesta seção serão utilizados futuramente.

Usando a aproximação de banda única, podemos reescrever a eq. (11) como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} C(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (12)$$

onde $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ é o orbital centrado no sítio \mathbf{R} . Por simplicidade, de agora em diante vamos usar a notação de Dirac, que torna o cálculo dos coeficientes e também das auto-energias muito mais simples algebricamente. Com a notação de Dirac, a eq. (12) pode ser reescrita como:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}}|\varphi_{\mathbf{R}}\rangle. \quad (13)$$

Já que estamos considerando que as funções de Wannier ϕ são os próprios orbitais φ , e já que as funções de Wannier formam uma base do espaço de funções, podemos escrever o Hamiltoniano nesta base:

$$H = \sum_{R,R'} |\varphi_R\rangle \langle \varphi_R | H | \varphi_{R'} \rangle \langle \varphi_{R'} |, \quad (14)$$

que pode ainda ser separada em termos diagonais e não diagonais:

$$H = \sum_R |\varphi_R\rangle \varepsilon_R \langle \varphi_R | + \sum_{R,R' \pm 1} |\varphi_{R'}\rangle V \langle \varphi_R |, \quad (15)$$

onde ε_R e V são os elementos de matriz diagonais e não diagonais do Hamiltoniano na base das funções de Wannier. A energia V é muitas vezes chamada de “energia de hopping” e está relacionada com a probabilidade de um elétron passar de um sítio para o sítio vizinho. A energia ε_R é também chamada de “energia de sítio” e está relacionada com a auto-energia do átomo localizado no sítio \mathbf{R} , como pode ser visto da eq. (6). Usando então a eq. de Schrödinger:

$$H|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle, \quad (16)$$

chegamos ao seguinte conjunto de equações lineares para os coeficientes C_R :

$$C_R(\varepsilon_R - \varepsilon) + V(C_{R+1} + C_{R-1}) = 0. \quad (17)$$

Note, porém, que a cadeia infinita possui simetria de translação, e, portanto, os coeficientes devem ser aqueles da eq. (9), isto é:

$$C_R = e^{ik \cdot R}, \quad (18)$$

e, finalmente, substituindo (18) em (17), obtemos a seguinte relação entre a energia e o vetor de onda k de um elétron se propagando numa cadeia linear infinita:

$$\varepsilon = \varepsilon_R + 2V \cos(ka), \quad (19)$$

Vale ressaltar aqui que os vetores de onda permitidos são todos os vetores da rede recíproca que satisfazem as condições de contorno de Born-Von Karman. No caso de uma cadeia linear, o espaçamento entre vetores de onda permitidos é inversamente proporcional ao número de átomos da cadeia. Sendo assim, para a cadeia infinita, há um contínuo de estados de propagação possíveis para o elétron, enquanto para uma cadeia finita, estes estados são discretos.

2.3 CÁLCULO DA TRANSMISSÃO COM A APROXIMAÇÃO TIGHT-BINDING

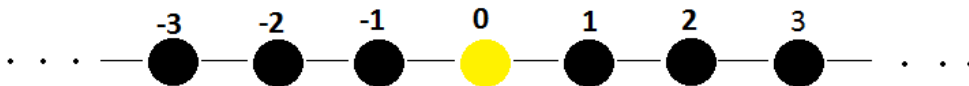


Figura 8: Cadeia linear infinita com um átomo diferente dos demais.

Com a finalidade de exemplificar a aplicabilidade da aproximação Tight-Binding no cálculo de propriedades de transporte, calculamos, nesta seção, o coeficiente de transmissão de uma cadeia linear infinita com parâmetro de rede 1, mas com um dos átomos diferente dos demais, como mostrado na Figura 8. Como na seção anterior, usando as equações (13), (15) e (16), chegamos a:

$$C_R(\varepsilon_R - \varepsilon) + V(C_{R+1} + C_{R-1}) = 0. \quad (20)$$

A diferença entre este caso e aquele reside no fato de a energia ε_0 do sítio 0 ser diferente das demais. Podemos, portanto, separar a equação (20) em duas:

$$C_R(\varepsilon_R - \varepsilon) + V(C_{R+1} + C_{R-1}) = 0, \quad R \neq 0, \quad (21)$$

e

$$C_0(\epsilon_0 - \epsilon) + V(C_1 + C_{-1}) = 0. \quad (22)$$

Agora, como estamos estudando a propagação eletrônica no sistema, supomos que os coeficientes têm a forma de ondas planas, isto é:

$$C_R = \begin{cases} e^{ikR} + re^{-ikR}, & R \leq 0 \\ te^{ikR}, & R \geq 0 \end{cases}, \quad (23)$$

onde t e r são os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente. Usando a condição de continuidade, vemos que

$$1 + r = t. \quad (24)$$

Supondo que a dependência da energia com o vetor de onda seja a mesma do caso da cadeia linear infinita e homogênea, e substituindo a equação (23) na equação (22), ficamos com:

$$C_0 = t = \frac{-2V\text{isen}(k)}{-2V\text{isen}(k) + \Delta\epsilon}, \quad (25)$$

onde $\Delta\epsilon = (\epsilon_0 - \epsilon_R)$. Note que o caso da cadeia linear infinita e homogênea é recuperado quando $\epsilon_0 = \epsilon_R$, no qual $t = 1$. A probabilidade de transmissão $T=|t|^2$ é dada por:

$$T = \frac{(2V\text{sen}(k))^2}{(2V\text{sen}(k))^2 + (\Delta\epsilon)^2}. \quad (26)$$

Resultados do coeficiente de transmissão para diferentes valores de $\Delta\epsilon$ são mostrados na Figura 9, incluindo o caso no qual $\Delta\epsilon = 0$, para o qual, como esperado, a transmissão é máxima para todos os valores de energia.

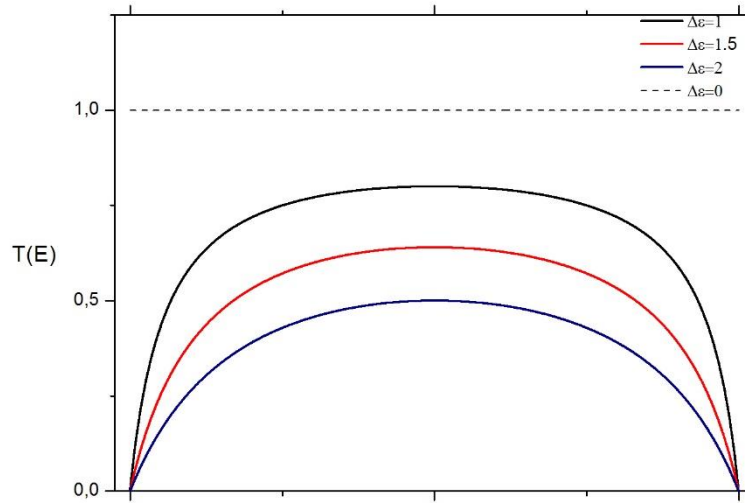


Figura 9: Probabilidade de transmissão em função da energia para $V=1$ e diferentes valores de ϵ .

2.4 TRANSMISSÃO POR DEFEITOS COMPLEXOS.

Na seção anterior, mostramos como é feito o cálculo da probabilidade de transmissão de uma cadeia linear com um defeito simples, isto é, com um átomo diferente dos demais. Nesta seção, vamos usar novamente a aproximação Tight-Binding de banda única para estudar as consequências decorrentes do acoplamento de defeitos mais complexos, compostos por mais de um átomo e com geometrias diferentes.

Veremos que o estudo deste tipo de sistema usando a aproximação Tight-Binding permite interpretar o efeito Fano de maneira mais direta e intuitiva, e que o estudo das propriedades de transporte nesses sistemas pode fornecer informações sobre a estrutura interna do defeito acoplado. Como mostrado na introdução, o estudo destes sistemas tem se mostrado frutífero, dando origem a diversos trabalhos e possíveis aplicações.

2.4.1 Cadeia Finita

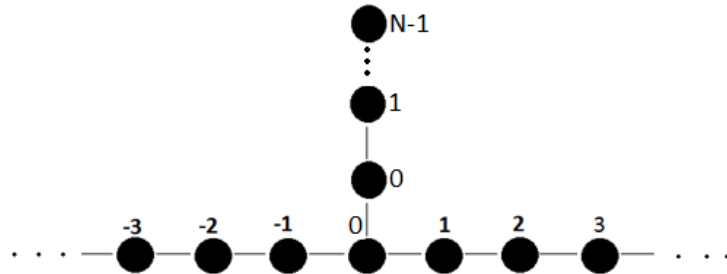


Figura 10: Cadeia linear acoplada a um defeito tipo fio finito.

Como um primeiro caso de um defeito complexo, consideremos uma cadeia infinita com uma cadeia finita acoplada localmente, ambas com parâmetro de rede 1. Uma ilustração deste sistema é mostrada na Figura 10. Como nos casos anteriores, começamos escrevendo a função de onda de um elétron de acordo com a aproximação Tight-Binding de banda única:

$$|\psi\rangle = \sum_R C_R |\varphi_R\rangle, \quad (27)$$

assim como o operador Hamiltoniano, escrito na base formada pelos orbitais atômicos:

$$H = \sum_R |\varphi_R\rangle \varepsilon_R \langle \varphi_R| + \sum_{R,R'\pm 1} |\varphi_{R'}\rangle V \langle \varphi_R|. \quad (28)$$

Agora vamos separar os orbitais em dois grupos, os que pertencem à cadeia infinita, representados por $|\alpha^i\rangle$, e os que pertencem ao defeito, representados por $|\beta^j\rangle$. Assim, a equação (27) pode ser reescrita como:

$$|\psi\rangle = \sum_i a_k^i |\alpha^i\rangle + \sum_j b_k^j |\beta^j\rangle. \quad (29)$$

A equação (28) pode então ser reescrita como uma soma de três partes, uma contendo apenas orbitais da cadeia infinita, uma contendo apenas orbitais do defeito e outra contendo orbitais tanto da cadeia quanto do defeito:

$$H = H_c + H_d + H_a, \quad (30)$$

onde:

$$\begin{cases} H_c = \sum_i |\alpha^i\rangle \epsilon_\alpha \langle \alpha^i| + \sum_{k,l=k\pm 1} |\alpha^l\rangle V_\alpha \langle \alpha^k|, \\ H_d = \sum_j |\beta^j\rangle \epsilon_\beta \langle \beta^j| + \sum_{m,n=m\pm 1} |\beta^n\rangle V_\beta \langle \beta^m|, \\ H_a = V_0(|\alpha^0\rangle \langle \beta^0| + |\beta^0\rangle \langle \alpha^0|). \end{cases} \quad (31)$$

De posse de (29) e (30), podemos usar a equação de Schrödinger:

$$H|\psi_k\rangle = \epsilon|\psi_k\rangle \quad (32)$$

para obtermos os coeficientes a_k^i e b_k^i , que, neste caso, são as soluções dos seguintes sistemas de equações lineares:

$$\begin{cases} (\epsilon - \epsilon_\alpha) a_k^p = V_\alpha (a_k^{p-1} + a_k^{p+1}) + V_0 b_k^0 \delta_{p,0}, \\ (\epsilon - \epsilon_\beta) b_k^q = V_\beta (b_k^{q-1} + b_k^{q+1}) + V_0 a_k^0 \delta_{q,0}. \end{cases} \quad (33)$$

$$(34)$$

Note que os coeficientes, de acordo com a equação (29), estão relacionados com a probabilidade de encontrar o elétron num sítio específico. Sendo assim, no estudo das propriedades de transporte desse sistema, a determinação dos coeficientes a_k é fundamental. Para isso, porém, precisamos desacoplar os sistemas (33) e (34). Usando a regra de Cramer no sistema de equações (34), obtemos a seguinte relação entre os coeficientes a_k^0 e b_k^0 :

$$b_k^0 = \frac{V_0 a_k^0 D'}{D}, \quad (35)$$

onde $D = \det[\epsilon I^N - H_r]$ e $D' = \det[\epsilon I^{N-1} - H_r']$, e as matrizes H_r e H_r' são:

$$H_r = \begin{pmatrix} \epsilon_\beta & V_\beta & 0 & \cdots & 0 \\ V_\beta & \epsilon_\beta & V_\beta & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & V_\beta & \epsilon_\beta \end{pmatrix}, \quad (36)$$

e:

$$H'_r = \begin{pmatrix} \epsilon_\beta & V_\beta & 0 & \cdots & 0 \\ V_\beta & \epsilon_\beta & V_\beta & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & V_\beta & \epsilon_\beta \end{pmatrix}, \quad (37)$$

sendo H_r uma matriz de dimensão N e H'_r uma matriz de dimensão N-1. Podemos, portanto, reescrever a equação (33) como:

$$(\epsilon - \epsilon_\alpha) a_k^p = V_\alpha (a_k^{p-1} + a_k^{p+1}) + \frac{V_0^2 a_k^0 D'}{D} \delta_{p,0}. \quad (38)$$

Note agora a semelhança entre a equação (38) e as equações (21) e (22) da seção anterior. Estas podem ser escritas como uma única equação:

$$C_R (\epsilon_R - \epsilon) + V (C_{R+1} + C_{R-1}) + C_0 \Delta \epsilon \delta_{R,0} = 0, \quad (39)$$

de onde podemos concluir que a consequência de acoplar localmente um defeito complexo é equivalente à de alterar a energia do sítio no qual ocorre o acoplamento. Uma sutileza digna de nota é o fato de a alteração mencionada depender da energia do elétron propagante. Veremos mais adiante que é justamente esta dependência com a energia é o que dá origem ao efeito Fano.

A semelhança entre as equações (38) e (39) pode ser escrita de forma representativa como:

$$\Delta \epsilon \rightarrow \frac{-V_0^2 D'}{D}. \quad (40)$$

2.4.1.1 Coeficiente de Transmissão

Estando estabelecidas as semelhanças entre o acoplamento de um defeito complexo e o acoplamento de um defeito simples a uma cadeia infinita, podemos prosseguir com o cálculo do coeficiente de transmissão da mesma maneira que fizemos na seção anterior, isto é, supondo que os coeficientes a_k têm a forma de ondas planas, como na equação (23), e aplicando as condições de contorno adequadas. Este processo, é claro, equivale a substituir (40) na equação (25) da seção anterior, o que resulta em:

$$t = \frac{-2V_\alpha i \operatorname{sen}(k)}{-2V_\alpha i \operatorname{sen}(k) - \frac{V_0^2 D'}{D}}. \quad (41)$$

Note que, de acordo com a eq. (41), a transmissão é suprimida sempre que $D=0$ e atinge seu valor máximo sempre que $D'=0$. Mas o que significam estas condições?

De acordo com a definição dos determinantes D e D' , juntamente com as equações (36) e (37), vemos que a condição $D=0$ é justamente a condição necessária para que a energia ϵ seja um dos auto-valores do operador hamiltoniano de um elétron em um fio finito de N átomos. De maneira semelhante a condição $D'=0$ é satisfeita sempre que a energia ϵ é um dos auto-valores do operador hamiltoniano de um elétron em um fio de $N-1$ átomos. Sendo assim, como os auto-valores de energia de um elétron em um fio de N átomos são:

$$E = \epsilon_\beta + 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right), \quad 1 \leq m \leq N, \quad (42)$$

Podemos escrever, fazendo $\epsilon_\beta = 0$ por conveniência, as seguintes expressões para D e D' :

$$\left\{ \begin{array}{l} D = \prod_{m=1}^N \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right), \\ D' = \prod_{m=1}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N}\right), \end{array} \right. \quad (43)$$

$$(44)$$

que resultam na seguinte expressão para a probabilidade de transmissão:

$$T = |t|^2 = \frac{\left| \prod_{m=1}^N \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right) \right|^2}{\left| \prod_{m=1}^N \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right) \right|^2 + V(k)^2 \left| \prod_{m=1}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N}\right) \right|^2}, \quad (45)$$

onde

$$V(k) = \frac{V_0^2}{2V_\alpha \sin(k)}. \quad (46)$$

Resultados do coeficiente de transmissão para alguns valores de N são mostrados na Figura 11.

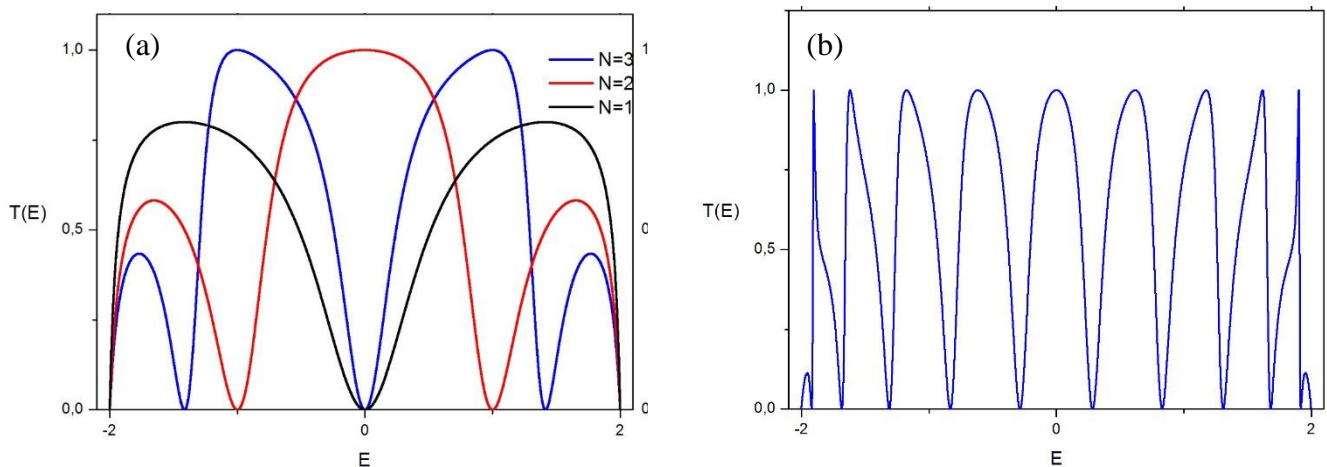


Figura 11: Probabilidade de transmissão em função da energia com os parâmetros $V_\alpha = V_\beta = V_0 = 1$ e $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = 0$ para (a) $N=1, 2$ e 3 e (b) $N=10$.

Dos resultados mostrados na Figura 11, algumas conclusões podem ser tiradas. Primeiramente, note que todos os gráficos apresentam simetria em relação a valores positivos e negativos da energia, evidência da simetria elétron-buraco neste sistema. Note também a alternância entre ressonância e antirressonância no centro da zona de Brillouin que acompanha a alternância do número de átomos no defeito, característica que sugere uma potencial aplicação do estudo do transporte eletrônico neste tipo de sistema, por exemplo, na detecção de partículas. Por último, note que o número de antirressonâncias é justamente o número de átomos no defeito, o que era de se esperar, já que os auto-estados de um fio finito não são degenerados.

2.4.2 Anel Quântico

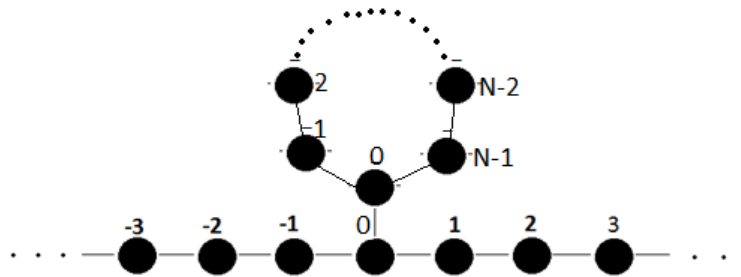


Figura 12: Cadeia linear acoplada a um defeito tipo anel quântico.

Outro sistema que podemos estudar é o de um anel quântico acoplado a uma cadeia infinita, ambos, aqui, com parâmetro de rede 1, como mostrado na Figura 12. Note, porém, que o tratamento usado na subseção anterior só leva em conta a identidade do defeito acoplado através da relação entre os coeficientes a_k^0 e b_k^0 , já que esta se dá por meio da solução do sistema de equações (34), que por sua vez depende unicamente da estrutura interna do defeito. Sendo assim, o sistema de equações que determina os coeficientes a_k permanece o mesmo:

$$(\epsilon - \epsilon_\alpha)a_k^p = V_\alpha(a_k^{p-1} + a_k^{p+1}) + \frac{V_0^2 a_k^0 D'}{D} \delta_{p,0}, \quad (47)$$

onde $D = \det[\epsilon I^N - H_r]$ e $D' = \det[\epsilon I^{N-1} - H'_r]$, mas, neste contexto, as matrizes H_r e H'_r são dadas por:

$$H_r = \begin{pmatrix} \epsilon_\beta & V_\beta & 0 & \cdots & V_\beta \\ V_\beta & \epsilon_\beta & V_\beta & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_\beta & 0 & \cdots & V_\beta & \epsilon_\beta \end{pmatrix}, \quad (48)$$

e

$$H'_r = \begin{pmatrix} \epsilon_\beta & V_\beta & 0 & \cdots & 0 \\ V_\beta & \epsilon_\beta & V_\beta & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & V_\beta & \epsilon_\beta \end{pmatrix}, \quad (49)$$

onde, como antes, H_r é uma matriz de dimensão N e H'_r é uma matriz de dimensão N-1. Veja que o fato de o anel quântico ser um sistema fechado se reflete em termos não nulos nos dois extremos da diagonal secundária de H_r , ou seja, os termos de hopping conectando os átomos 1 e N são não nulos. Fisicamente, isto significa que existe a possibilidade de um elétron no átomo um “pular” para o átomo N e vice versa.

De acordo com a definição de D e D' e das equações (48) e (49), podemos notar, como anteriormente, que a condição D=0 é justamente a condição para que a energia ϵ seja um dos auto-valores de energia do operador hamiltoniano de um elétron em anel de N átomos, enquanto a condição D'=0, como na subseção anterior, é satisfeita quando a energia é um dos auto-valores do operador hamiltoniano de um elétron em um fio de N-1 átomos. Sendo assim, como as auto-energias de um elétron em um anel de N átomos são:

$$E = \epsilon_\beta + 2V_\beta \cos\left(\frac{2m\pi}{N}\right), \quad 0 \leq m \leq N-1, \quad (50)$$

podemos escrever:

$$\begin{cases} D = \prod_{m=0}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{2m\pi}{N}\right), \\ D' = \prod_{m=1}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N}\right). \end{cases} \quad (51)$$

$$(52)$$

Utilizando agora as equações (47), (51) e (52), podemos novamente usar (40) para reescrever (25), obtendo a seguinte expressão para a probabilidade de transmissão:

$$T = |t|^2 = \frac{\left| \prod_{m=0}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{2m\pi}{N}\right) \right|^2}{\left| \prod_{m=0}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{2m\pi}{N}\right) \right|^2 + V(k)^2 \left| \prod_{m=1}^{N-1} \epsilon - 2V_\beta \cos\left(\frac{m\pi}{N}\right) \right|^2}, \quad (53)$$

onde $V(k)$ é dado por (46). Resultados para o coeficiente de transmissão do sistema cadeia-anel quântico composto por diferentes valores de N são mostrados na Figura 13.

Os resultados mostram que, assim como caso do defeito tipo fio finito, este sistema apresenta simetria elétron-buraco quando o número de átomos no anel é par. A alternância entre

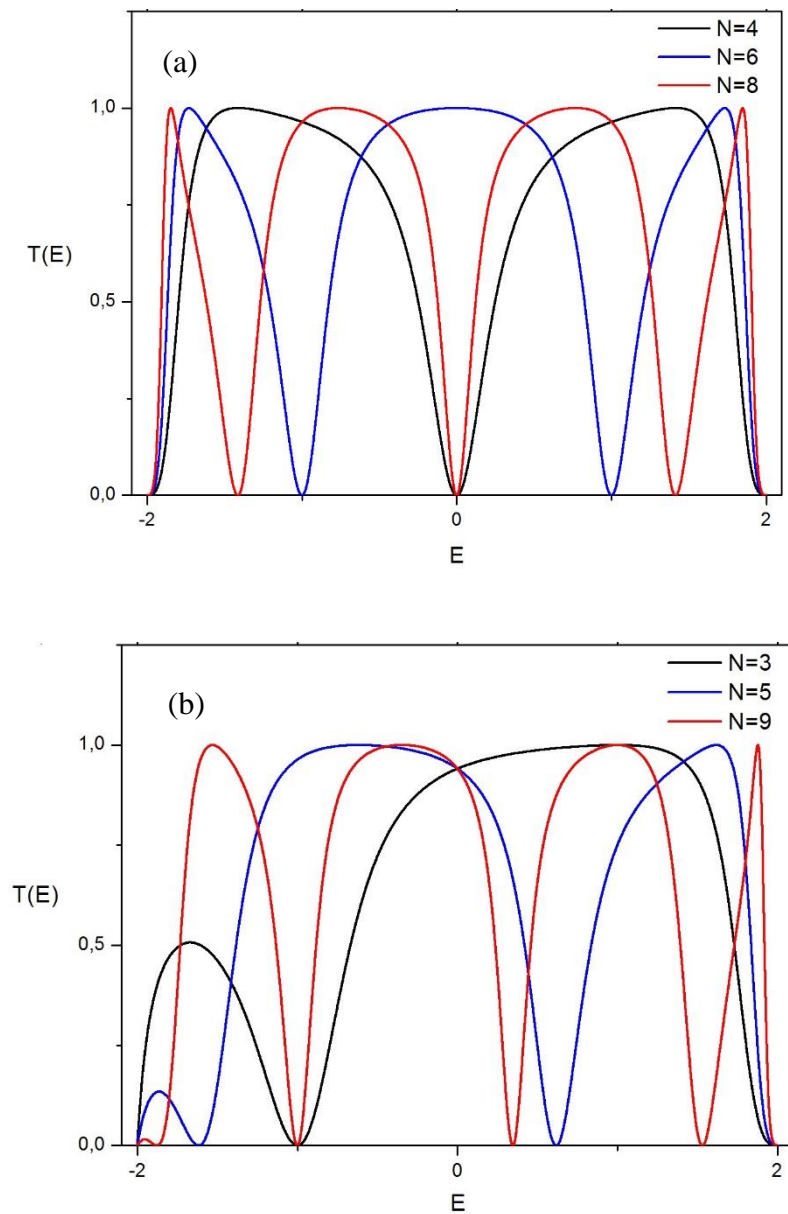


Figura 13: Probabilidade de transmissão em função da energia com os parâmetros $V_\alpha = V_\beta = V_0 = 1$ e $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta = 0$ para números (a) pares e (b) ímpares de átomos no anel.

ressonância e antirressonância no centro da zona de Brillouin também ocorre para um número par de átomos no anel, mas, neste caso, acompanha a alternância entre números pares vizinhos, como mostra a Figura 13.

Quando o número de átomos no anel é ímpar, a simetria elétron-buraco é perdida e nada de especial acontece no centro da zona de Brillouin. Vale ressaltar, porém, que os resultados mostram ressonâncias Fano altamente assimétricas nas proximidades da fronteira da zona de Brillouin, assim como a ocorrência de antirressonâncias em energias fixas, como pode ser visto na Figura.

Outra característica deste sistema é o fato de o número de antirressonâncias dentro da zona de Brillouin ser menor que o número de auto-estados do anel. Isto deve-se em parte ao fato de algumas auto-energias de um anel de N átomos serem iguais às de um fio de $N-1$ átomos. Esta igualdade faz com que alguns termos nos produtórios em (53) se cancelem, dando origem ao comportamento observado. Além disso, alguns auto-estados de um anel de N átomos são degenerados, fato este que contribui para um número menor de antirressonâncias na transmissão quando comparado ao número de átomos.

3 CONCLUSÕES

Nas seções anteriores, estudamos o comportamento da transmissão eletrônica por defeitos complexos. Como consequência deste estudo, vimos que, para as propriedades de transporte, acoplar um defeito complexo a uma cadeia infinita é equivalente a acoplar um defeito simples cuja energia de sítio depende da energia do próprio elétron incidente. Como mostram os resultados, esta dependência se dá de maneira peculiar, dando origem a ressonâncias e anti-ressonâncias Fano na transmissão.

Em ambos os casos estudados, as energias nas quais a transmissão é completamente suprimida (anti-ressonâncias Fano) são justamente as auto-energias do defeito em questão. Este comportamento está presente em diversos sistemas, como foi mostrado na introdução desta monografia, e é a razão de o estudo do efeito Fano estar relacionado com a construção de sensores e biosensores. A detecção de uma nanopartícula por uma microcavidade óptica é um exemplo no qual este comportamento é essencial, já que a detecção se dá a partir da análise de modos não degenerados de propagação na cavidade, em cujas frequências a transmissão apresenta anti-ressonâncias Fano.

Os máximos da transmissão (ressonâncias Fano), por sua vez, ocorrem nas auto-energias do sistema formado pela parte do defeito que não está ‘conectada’ com a cadeia infinita. Este comportamento é observado em diversos sistemas e também é importante. Há exemplos na literatura que sugerem uma potencial aplicação deste comportamento na manipulação da interação entre a luz e a matéria (Mu-Tian Cheng *et al*, 2012).

A generalidade dos conceitos e resultados envolvidos neste estudo motiva uma análise mais profunda do efeito Fano, buscando, através da sofisticação, maior riqueza de detalhes. A curto prazo, por exemplo, objetivamos implementar o formalismo das funções de Green aos cálculos, para que assim possamos estudar nanoestruturas que apresentam geometrias mais complicadas. O alvo desta pesquisa, a longo prazo, é o estudo das propriedades de transporte de nanoestruturas de carbono.

4 REFERÊNCIAS

GRIFFITHS, David J., **Quantum Mechanics, 2nd ed.** Reed College: Prentice Hall, 2011.

KRANE, Kenneth S., **Introductory Nuclear Physics, 3rd ed.** Oregon: Willey, 1987

ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, David M., **Solid State Physics.** Cornell: Saunders, 2011

MIROSHNICHENKO, Andrey E.; FLACH, Serguej; KIVSHAR, Yuri S., Fano Resonances in Nanoscale Structures. **Reviews of Modern Physics, volume 82**, Setembro 2010.

MIROSHNICHENKO, Andrey E.; XU, Yu, Manipulation of the Resonance Interaction In Mach-Zender-Fano Interferometers, **Physical Review A 84, 033828**, Setembro 2011.

CHENG, Mu-Tian; MA, Xiao-San; DING, Meng-Ting; LUO, Ya-Qin; ZHAO, Guang-Xing, Single Photon Transport in One-Dimensional Coupled-Resonator Waveguide With Local and Nonlocal Coupling to a Nanocavity Containing a Two-Level System, **Physical Review A 85, 053840**, Maio 2012.

ZHU, Jiangang; Ozdemir, Sahin Kaya; XIAO, Yu-Feng; LI, Lin; HE, Lina; CHEN, Da-Ren; YANG, Lan, On Chip Single Nanoparticle Detection and Sizing by Mode Splitting in a Ultrahigh-Q Microresonator, **Nature Photonics 4, 46-49**, Dezembro 2010.

ROCHA, Claudia Gomes Da. **Propriedades Físicas de Nanotubos de Carbono.** 2005. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2005.