

Dedução da Matriz do Hamiltoniano *Tight Binding* usando a discretização da Equação de Schrödinger

Deduction of the Tight-Binding Hamiltonian Matrix using the discretization of the Schrödinger Equation

Rodrigo M. Costa¹, Michel Mendoza^{*1}

¹Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas, 09210-170, Santo André, SP, Brasil.

Recebido em 22 de maio de 2020. Revisado em 19 de junho de 2020. Aceito em 22 de junho de 2020.

Neste trabalho realizamos a montagem de uma matriz hamiltoniana para um gás de elétrons bidimensional não interagente. Estes sistemas podem ser formados na interface de heteroestruturas de GaAs-AlGaAs e, na presença de potenciais de confinamento, serem usados como transistores quânticos. Partindo da equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva, deduzimos os Hamiltonianos 1D e 2D na base de sítios *Tight Binding*. Estes Hamiltonianos foram obtidos através do procedimento de discretização da equação de Schrödinger. Para o caso unidimensional, o resultado encontrado foi a conhecida matriz tridiagonal e, para o caso bidimensional, uma matriz de blocos tridiagonais. A discretização realizada permitiu a dedução dos valores das energias de sítio e de *hopping* do sistema estudado. Estes resultados demonstraram a ligação direta entre a equação de Schrödinger e o método *Tight Binding*, e, tais resultados, são muito úteis na realização de métodos numéricos, os quais não são abordados na literatura básica de Física do Estado Sólido.

Palavras-chave: *Tight Binding*, equação de Schrödinger, discretização.

In this work, we set up a Hamiltonian matrix for a non-interacting two-dimensional electron gas. These systems can be formed at the heterostructures interface of GaAs-AlGaAs and, in the presence of confinement potentials, be used as quantum transistors. Starting from the Schrödinger equation in the approximation of the effective mass, we deduce the Hamiltonians 1D and 2D on the basis of Tight-Binding sites. These Hamiltonians were obtained through the procedure of discretization of the Schrödinger equation. For the one-dimensional case, the result found was the well-known tridiagonal matrix and, for the two-dimensional case, a block tridiagonal matrix. The discretization performed allowed the deduction of the values of the site and hopping energies of the studied system. These results demonstrate the direct link between the Schrödinger equation and the Tight-Binding method, and such results are very useful in the realization of numerical methods, which are not addressed in the basic literature of Solid State Physics.

Keywords: Tight Binding, Schrödinger equation, discretization.

1. Introdução

O método *Tight Binding* [1–4] (ligações fortes) é um método empírico geralmente demonstrado na literatura básica da Física do Estado Sólido de forma intuitiva, sem a utilização direta da equação de Schrödinger. Esta forma de demonstração muitas vezes obscurece a importante ligação entre a equação de Schrödinger e o método *Tight Binding*. O principal objetivo deste trabalho é justamente esclarecer esta ligação, assim como mostrar a base teórica de resultados encontrados na literatura, que usam o cálculo numérico.

O formalismo *Tight Binding* é utilizado principalmente para o cálculo da estrutura de bandas de energia dos principais semicondutores: Ge, Si e GaAs [4, 5]. Nestes materiais se observa que para determinada orientação espacial, o fundo da banda de condução é aproximadamente parabólico. O formato parabólico indica que os

portadores de carga se comportam como partículas livres na direção observada, ou seja, o elétron se comporta como uma onda livre com uma massa efetiva aumentada (quase-partícula). Desta forma, as propriedades de transporte eletrônico, associadas com as probabilidades de transmissão, podem ser modeladas usando a aproximação da massa efetiva [5–7]. A equação básica para esta aproximação é denominada equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva ou aproximação da função envelope. Esta equação é escrita como,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left[\frac{1}{m^*(r)} \nabla \psi(r) \right] + V(r) \psi(r) = E \psi(r) \quad (1)$$

Onde a massa efetiva $m^*(r)$ da quase-partícula eletrônica, pode mudar em função da posição, fenômeno este que ocorre nas heteroestruturas baseadas em GaAs e AlGaAs [5, 7, 8], mostrada na Fig.1(a). Aqui através da direção z , a quase-partícula muda de massa efetiva quando passa do GaAs (m_1^*) para o AlGaAs (m_2^*). Por

*Endereço de correspondência: michel.mendoza@ufabc.edu.br.

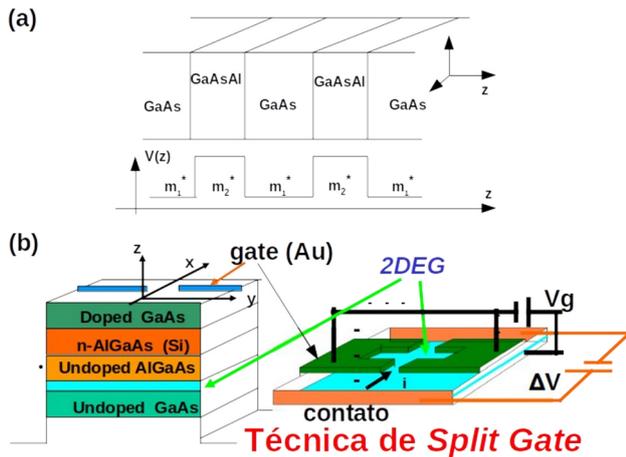


Figura 1: (a) Representação pictórica de uma heteroestrutura de GaAs e AlGaAs crescida epitaxialmente na direção z (parte superior). O GaAs se comporta como um poço de potencial e o AlGaAs como uma barreira de potencial (parte inferior). Desta forma na direção z o sistema é confinado e na direção xy a partícula é totalmente livre. (b) Representação pictórica de um 2DEG formado na interface entre o GaAs e AlGaAs (plano xy), na esquerda. A técnica de *split gate* permite gerar uma caixa quântica aberta controlada pelos potenciais V_g e ΔV , na direita.

causa nas similitudes entre os tamanhos dos átomos de Ga, As e Al, as interfaces entre os materiais geram potenciais abruptos. Desta forma, o GaAs se comporta como um poço de potencial e o AlGaAs se comporta como uma barreira de potencial, conforme demonstrado na parte inferior da Fig.1(a), onde o perfil de potencial está associado com o fundo da banda de condução ao longo do eixo z . Temos aqui um confinamento unidimensional da quase-partícula na direção z e um comportamento livre nas outras direções. Sistemas como estes são denominados diodos de tunelamento ressonante [9, 10], e tem sido bastante estudados experimentalmente. Por outro lado, o modelamento das propriedades importantes do transporte eletrônico nestes sistemas é feito numa dimensão (1D), como por exemplo, ao longo do eixo z [11, 12].

Estas heteroestruturas de GaAs e AlGaAs, permitem também gerar sistemas bidimensionais (2D). Em geral, na interface do GaAs/AlGaAs se forma o conhecido gás de elétrons bidimensional de GaAs (2DEG) [5, 7, 8]. Uma representação ilustrativa disto é mostrado na parte esquerda da Fig.1(b). Este 2DEG pode ser confinado nas duas direções (x, y), gerando-se assim um poço quântico ou *quantum dot* [5, 7, 13, 14]. Uma forma de realizar o confinamento bidimensional é utilizar-se de técnicas de *split gate* [15, 16], onde material metálico é crescido na parte superior da heteroestrutura. Após este crescimento, aplicando-se um potencial de *gate* V_g , o 2DEG será confinado eletrostaticamente [verificar a parte da direita da Fig.1(b)]. Posteriormente, aplicando-se uma diferença de potencial ΔV , uma corrente i pode ser induzida, por exemplo, ao longo da direção x . Por causa da formação

do 2DEG na região do GaAs a massa efetiva não mudará e a dependência espacial com a massa não aparecerá mais na equação (1).

Os sistemas de baixa dimensionalidade (1D e 2D), discutidos acima são denominados sistemas mesoscópicos [17, 18] e tem sido bastante utilizados nas propostas de transistores quânticos [10, 16, 19]. Nestes sistemas, as regiões confinadas são bem maiores que a escala atômica, da ordem do comprimento de onda da quase-partícula (400 Å). Esta condição garante que a única fonte de espalhamento sejam os potenciais de confinamento (barreiras quânticas) e que o sistema seja governado pelos efeitos de interferência quântica. As regiões confinadas, poços quânticos e pontos quânticos, são também denominadas como átomos artificiais 1D e 2D, respectivamente. As autofunções para estes átomos artificiais são denominadas por funções envelope, e serão calculadas através da equação (1). Na aproximação da massa efetiva, as flutuações da função de onda ao redor de cada átomo (do material) não é importante, e sim a função envelope sobre essas flutuações ao longo do material ou átomo artificial (dezenas ou centenas de átomos naturais). Desta forma, utilizaremos a equação (1) como ponto de partida para construirmos o Hamiltoniano *Tight Binding* associado aos sistemas discutidos anteriormente.

A partir de agora construiremos intuitivamente o Hamiltoniano *Tight Binding* baseados na Fig.2. Imaginemos um conjunto de átomos (naturais ou artificiais) que estejam separados de tal forma que as ondas eletrônicas associadas a eles não possam ser acopladas, como por exemplo, o conjunto unidimensional ilustrado na Fig.2(a). Esses átomos conformam uma base de estados quânticos, e, na notação de posição, podem ser escritos como: $|i\rangle$, com $i : 1, 2, 3, \dots, N$. Esta base também é conhecida como base de sítios atômicos [20, 21]. A situação descrita resultará em um sistema degenerado (com a mesma energia para todos os sítios) e o Hamiltoniano H na base de sítios $|i\rangle$ será diagonal.

Iremos, agora, imaginar uma situação contrária onde os mesmos átomos ou sítios fiquem muito perto um dos outros, de forma que suas funções de onda fiquem superpostas. O fenômeno resultante é o acoplamento quântico, ver a parte (b). Neste caso, o sistema deixa de ser degenerado e se forma um conjunto de N novos estados, onde cada novo estado será uma combinação linear dos estados $|i\rangle$ e N representará o número inicial de átomos desacoplados. Para o caso de N muito grande, se formaria uma banda de energia com N estados, onde o centro da banda seria a energia do átomo isolado, ver parte (c). O Hamiltoniano H na base de sítios $|i\rangle$, por sua vez, não será diagonal nesta situação e os elementos de matriz na diagonal $\langle i|H|i\rangle$ serão os valores esperados de energia para cada sítio, denominados de energia de sítio ϵ_s^i . Por outro lado, os elementos de matriz fora da diagonal $\langle i|H|j\rangle$ estarão associados às transições de um sítio para outro (tunelamento quântico), as quais são denominadas de energia de *hopping t*. A energia de

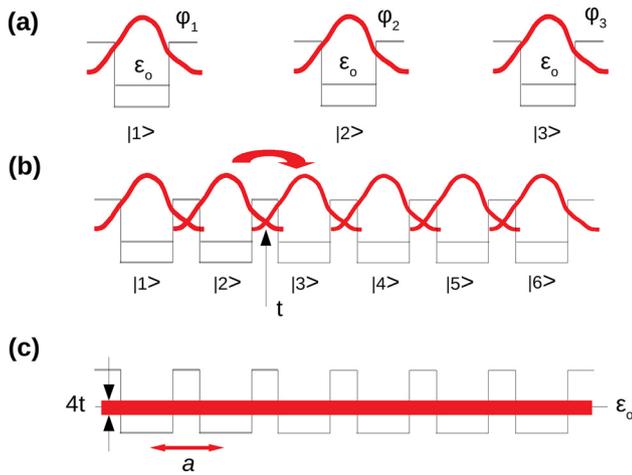


Figura 2: (a) Átomos (naturais ou artificiais) ou sítios desacoplados totalmente. (b) Os sítios anteriores agora acoplados mediante uma energia de hopping t . (c) O sistema acoplado forma uma banda de energia ao redor da energia de sítio ϵ_0 .

hopping t para acoplamentos que ocorrem apenas entre os primeiros vizinhos é constante e isto acontece devido a simetria do sistema. Todas estas observações podem ser representadas na matriz Hamiltoniana dada por:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_s^1 & t & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ t & \epsilon_s^2 & t & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & t & \epsilon_s^3 & t & 0 & \dots & \dots \\ \dots & 0 & t & \epsilon_s^4 & t & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & t \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & t & \epsilon_s^N \end{pmatrix} \quad (2)$$

Nesta Hamiltoniana, para o caso 1D, os elementos da diagonal são as energias de cada sítio, e cada sítio se acopla com outro mediante a energia de hopping t [7, 8]. A aproximação *Tight Binding* (ligações fortes) significa que a energia de cada sítio é pouca alterada em relação com a energia do sítio não perturbado pelo acoplamento (átomo, poço quântico ou *quantum dot*), ou seja, podemos desprezar essa pequena mudança e usar $\epsilon_s^i = \epsilon_0$ para todo $|i\rangle$.

Na seção seguinte, partindo da equação de Schrödinger, equação (1), e utilizando-se de um procedimento de discretização, deduziremos a matriz *Tight Binding* mostrada na equação (2). Posteriormente faremos uma extensão deste procedimento e deduziremos a matriz *Tight Binding* para o caso 2D [7, 22].

2. Dedução da Matriz *Tight Binding*

Nesta parte do trabalho utilizaremos a técnica de diferenças finitas para discretizar a equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva. Em geral, isto significa

especificamente discretizar o comportamento contínuo da função de onda envelope, para encontrar um Hamiltoniano *Tight Binding*.

2.1. Caso 1D

A equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva para uma partícula independente, restrita a uma dimensão e sem mudança da massa efetiva é:

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

A função de onda da nossa quase-partícula eletrônica de massa efetiva m^* , expandida na fórmula de Taylor [23] pode ser escrita como:

$$\psi(x) = \psi(x_0) + \psi'(x_0)\Delta x + \frac{\psi''(x_0)\Delta x^2}{2} + \frac{\psi'''(x_0)\Delta x^3}{6} + \dots$$

com $\Delta x = x - x_0$.

Considerando que os fatores a partir da terceira derivada pouco contribuem, temos que:

$$\psi(x) = \psi(x_0) + \psi'(x_0)\Delta x + \frac{\psi''(x_0)\Delta x^2}{2}$$

Está é uma boa aproximação quando Δx é muito pequeno. Como $x = x_0 + \Delta x$, então $\psi(x) = \psi(x_0 + \Delta x)$, e como x_0 pode tomar qualquer valor x , vamos deixar tudo em função de x , ou seja, $x_0 \rightarrow x$

$$\psi(x + \Delta x) = \psi(x) + \psi'(x)\Delta x + \frac{\psi''(x)\Delta x^2}{2}$$

Para $\psi(x - \Delta x)$, o fator Δx da relação anterior ficará negativo nas derivadas ímpares, ou seja:

$$\psi(x - \Delta x) = \psi(x) - \psi'(x)\Delta x + \frac{\psi''(x)\Delta x^2}{2}$$

Somando as duas equações, obtemos:

$$\psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) = 2\psi(x) + \psi''(x)\Delta x^2$$

Isolando a segunda derivada:

$$\psi''(x) = \frac{1}{\Delta x^2}[\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)]$$

O termo Δx é a distância entre duas posições vizinhas e pode ser entendido fisicamente como a distância entre os sítios da discretização. Iremos, portanto, substituir este termo pelo parâmetro de rede a .

$$\psi''(x) = \frac{1}{a^2}[\psi(x + a) - 2\psi(x) + \psi(x - a)] \quad (4)$$

Substituindo este último resultado na equação (3), obtemos:

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} [\psi(x+a) - 2\psi(x) + \psi(x-a)] + V(x)\psi(x)$$

O índice de sítio m (dada pela discretização) vezes o parâmetro de rede a , pode ser igualado com o comprimento x unidimensional. Desta forma:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi(am) \equiv |m\rangle > \\ \psi(x+a) &\equiv |m+1\rangle > \\ \psi(x-a) &\equiv |m-1\rangle > \end{aligned}$$

E, adotando esta última notação, teremos:

$$H|m\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [|m+1\rangle - 2|m\rangle + |m-1\rangle] + V_m|m\rangle$$

aqui $V(x) = V_m$.

Realizando a distributiva:

$$H|m\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) |m+1\rangle + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) |m-1\rangle + \left(\frac{\hbar^2}{m^* a^2} + V_m\right) |m\rangle$$

Desta forma, os elementos de matriz da Hamiltoniana H na base de sítios $|m\rangle$ ($|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots$) seriam:

$$\begin{aligned} \langle m'|H|m\rangle &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) \langle m' ||m+1\rangle \\ &+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) \langle m' ||m-1\rangle + \left(\frac{\hbar^2}{m^* a^2} + V_m\right) \langle m' ||m\rangle \end{aligned} \tag{5}$$

Usando a função delta de Kronecker,

$$\langle i||j\rangle = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

calculamos os elementos de matriz. Considerando m' fila e m coluna, os elementos da diagonal ($m' = m$) estariam dados por:

$$\langle m|H|m\rangle = \left(\frac{\hbar^2}{m^* a^2} + V_m\right) = \epsilon_s$$

estes serão os valores para os elementos de matriz $\langle 1|H|1\rangle, \langle 2|H|2\rangle, \langle 3|H|3\rangle, \dots$, e, conseqüentemente, os valores das energias de sítio ϵ_s do Hamiltoniano *Tight Binding*, quando um potencial de impureza se encontra no sítio. Se o sistema estivesse limpo (livre de imperfeições ou impurezas) $V_m = 0$. Por outro lado, lembremos que o potencial V_m está associado com o potencial $V(x)$ da equação (3), o qual seria um potencial externo aplicado no sistema, como por exemplo, uma barreira de

potencial. Desta forma, V_m permite modelar um potencial eletrostático de confinamento do tipo mostrado na Fig.1(a) para um diodo de tunelamento ressonante.

A equação (5) também permite calcular os elementos de matriz de H que se encontram fora da diagonal. Esta equação mostra que os únicos elementos diferentes de zero, são aqueles que unem os sítios de primeiros vizinhos, por exemplo, $\langle 1|H|2\rangle, \langle 2|H|3\rangle, \langle 3|H|4\rangle, \dots, \langle 2|H|1\rangle, \langle 3|H|2\rangle, \langle 4|H|3\rangle, \dots$, relacionados com os elementos $\langle m'|H|m\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) \langle m' ||m-1\rangle$ e $\langle m'|H|m\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) \langle m' ||m+1\rangle$. Destas últimas relações, podemos deduzir que os elementos de matriz que unem os segundos vizinhos, terceiros vizinhos, etc, são nulos.

Então a energia de *hopping* (entre primeiros vizinhos) para o caso unidimensional (cadeia 1D) é dada por:

$$t_x = t = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$$

e a matriz do Hamiltoniano H na base de sítios *Tight Binding* para 1 dimensão é uma matriz tridiagonal, como aquela mostrada na equação (2). Esta matriz *Tight Binding* com somente interação de primeiros vizinhos foi deduzida realizando um procedimento de discretização da equação de Schrödinger.

Para incluir, por exemplo, interação de segundos vizinhos, podemos mudar a por $2a$ na equação (4), somar essa nova equação com a própria equação (4), deixar em evidência $\psi''(x)$, e, posteriormente, substituir este último resultado na equação (3). Seguindo um procedimento análogo com o explicado depois da equação (4), podemos chegar num hamiltoniano *Tight Binding* que inclua a interação com os segundos vizinhos. De forma similar poderíamos incluir as interações com os vizinhos seguintes.

A continuação discutiremos o efeito de massa efetiva variável, como aquele que acontece nos diodos de tunelamento ressonante [Fig.1(a)]. A equação (1) em 1D pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi(z) \right] + V(z)\psi(z) = E\psi(z)$$

derivando usando a regra da cadeia, e depois usando os resultados obtidos da fórmula de Taylor,

$$\frac{d}{dz} f(z) \approx \frac{f(z+a) - f(z-a)}{2a}$$

$$\frac{d^2}{dz^2} f(z) \approx \frac{f(z+a) - 2f(z) + f(z-a)}{a^2}$$

obtemos,

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{8a^2} \left[\frac{1}{m^*(z+a)} - \frac{1}{m^*(z-a)} \right] [\psi(z+a) - \psi(z-a)] \\ &-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)a^2} [\psi(z+a) - 2\psi(z) + \psi(z-a)] \\ &+ V(z)\psi(z) = E\psi(z) \end{aligned}$$

fazendo

$$M = \left[\frac{1}{m^*(z+a)} - \frac{1}{m^*(z-a)} \right],$$

e reagrupando teremos:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)a^2} \left[1 + \frac{m^*(z)M}{4} \right] \psi(z+a) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)a^2} \left[1 - \frac{m^*(z)M}{4} \right] \psi(z-a) \\ & + \left[\frac{\hbar^2}{m^*(z)a^2} + V(z) \right] \psi(z) = H\psi(z) = E\psi(z) \end{aligned}$$

Finalmente, passando para a notação de Dirac, encontramos a equação geradora dos elementos de matriz do Hamiltoniano H ,

$$\begin{aligned} H|m\rangle &= \left[\frac{\hbar^2}{m^*(z)a^2} + V_m \right] |m\rangle - \\ & \frac{\hbar^2}{2m^*(z)a^2} \left[1 + \frac{m^*(z)M}{4} \right] |m+1\rangle - \\ & \frac{\hbar^2}{2m^*(z)a^2} \left[1 - \frac{m^*(z)M}{4} \right] |m-1\rangle \end{aligned}$$

Desta equação observamos que unicamente as energias de *hopping* são afetadas pela mudança da massa efetiva, e que este novo efeito (em relação ao caso de massa efetiva constante), somente acontece nas interfaces da heteroestrutura [Fig.1(a)], onde teremos a mudança da massa efetiva. Nas regiões do GaAs e do AlGaAs $M = 0$, como já tínhamos encontrado antes. Em geral, a massa efetiva de cada material depende da concentração de Al, e V_m seria a diferença de energias entre os fundos das bandas de condução do GaAs e AlGaAs [24].

2.2. Caso 2D

Realizaremos agora o procedimento de discretização para o caso bidimensional. A equação de Schrödinger em duas dimensões pode ser descrita como:

$$\begin{aligned} H\psi(x,y) &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \psi(x,y) + V(x,y)\psi(x,y) \\ &= E(x,y)\psi(x,y) \end{aligned} \tag{6}$$

Sendo m^* a massa efetiva da quasi-partícula no fundo da banda de condução do 2DEG de GaAs. Neste caso, o Hamiltoniano é:

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V(x,y)$$

Considerando a demonstração do caso unidimensional, iremos fazer a expansão de Taylor para cada uma das variáveis x e y .

Mantendo a variável y fixa e expandindo a variável x teremos:

$$\psi(x + \Delta x, y) = \psi(x, y) + \psi'_x(x, y)\Delta x + \frac{\psi''_x(x, y)\Delta x^2}{2}$$

Onde o subíndice x na primeira e segunda derivada indica a derivada parcial em x .

O mesmo procedimento será feito para $\psi(x - \Delta x, y)$:

$$\psi(x - \Delta x, y) = \psi(x, y) - \psi'_x(x, y)\Delta x + \frac{\psi''_x(x, y)\Delta x^2}{2}$$

Somando as duas equações:

$$\begin{aligned} \psi''_x(x, y)\Delta x^2 + 2\psi(x, y) &= \psi(x + \Delta x, y) + \\ & \psi(x - \Delta x, y) \end{aligned}$$

Isolando a segunda derivada obtemos:

$$\begin{aligned} \psi''_x(x, y) &= \frac{1}{\Delta x^2} [\psi(x + \Delta x, y) - 2\psi(x, y) \\ & + \psi(x - \Delta x, y)] \end{aligned}$$

Agora, expandindo a variável y e mantendo x constante, teremos:

$$\psi(x, y + \Delta y) = \psi(x, y) + \psi'_y(x, y)\Delta y + \frac{\psi''_y(x, y)\Delta y^2}{2}$$

E a expansão em $\psi(x, y - \Delta y)$:

$$\psi(x, y - \Delta y) = \psi(x, y) - \psi'_y(x, y)\Delta y + \frac{\psi''_y(x, y)\Delta y^2}{2}$$

Somando as duas equações e isolando a segunda derivada obtemos:

$$\begin{aligned} \psi''_y(x, y) &= \frac{1}{\Delta y^2} [\psi(x, y + \Delta y) - 2\psi(x, y) \\ & + \psi(x, y - \Delta y)] \end{aligned}$$

Como $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \psi''_x(x, y)$ e $\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \psi''_y(x, y)$,

podemos incluir estes resultados na equação (6). Considerando que o parâmetro de rede na discretização ao longo de x e de y é o mesmo (espaçamento entre sítios vizinhos), podemos substituir $\Delta y = \Delta x = a$. Esta simetria pode ser usada diretamente no 2DEG de GaAs, por que a onda eletrônica no fundo da banda de condução associa-se com o orbital s , simétrico nas duas direções. Desta forma a equação (6) fica:

$$H\psi(x, y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\psi(x, y + a) - 2\psi(x, y) + \psi(x, y - a)] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\psi(x + a, y) - 2\psi(x, y) + \psi(x - a, y)] + V(x, y)\psi(x, y)$$

Agrupando os termos teremos:

$$H\psi(x, y) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\psi(x, y + a) - 4\psi(x, y) + \psi(x, y - a)] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\psi(x + a, y) + \psi(x - a, y)] + V(x, y)\psi(x, y)$$

Agora iremos fazer a mudança de coordenadas da mesma forma que no caso unidimensional, ou seja, $x = am$ e $y = an$. Adotando a notação de braknet:

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \psi(am, an) \equiv |m, n\rangle \\ \psi(x + a, y) &\equiv |m + 1, n\rangle \\ \psi(x - a, y) &\equiv |m - 1, n\rangle \\ \psi(x, y + a) &\equiv |m, n + 1\rangle \\ \psi(x, y - a) &\equiv |m, n - 1\rangle \end{aligned}$$

Onde m e n são os índices de sítio longitudinal e transversal, respetivamente, produto da discretização [ver Fig.3(a)].

Desta forma, escrevendo a última equação na nova notação e agrupando os termos, temos:

$$H|m, n\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [|m, n + 1\rangle + |m, n - 1\rangle] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [|m + 1, n\rangle + |m - 1, n\rangle] + \left(\frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{m,n}\right) |m, n\rangle$$

Aplicando o bra podemos obter os elementos da matriz Hamiltoniana:

$$\begin{aligned} \langle m', n' | H | m, n \rangle &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle m', n' | | m, n + 1 \rangle + \langle m', n' | | m, n - 1 \rangle] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle m', n' | | m + 1, n \rangle + \langle m', n' | | m - 1, n \rangle] + \left(\frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{m,n}\right) \langle m', n' | | m, n \rangle \end{aligned} \tag{7}$$

Considerando uma representação de cadeias transversais, ver Fig.3(a) (onde cada cadeia transversal é definida com o índice longitudinal m), cada elemento de matriz do tipo $\langle 1, n' | H | 1, n \rangle = \langle 1 | H_{n',n} | 1 \rangle$, $\langle 2, n' | H | 2, n \rangle = \langle 2 | H_{n',n} | 2 \rangle$, $\langle 3, n' | H | 3, n \rangle = \langle 3 | H_{n',n} | 3 \rangle$, representa uma cadeia transversal de n sítios, e, nesta representação de cadeias transversais, estes elementos de matriz

(submatrizes) se encontram na diagonal da matriz Hamiltoniana. Cada uma destas submatrizes terá a forma da matriz de cadeia dada pela equação (2).

Por exemplo, a submatriz $\langle 1, n' | H | 1, n \rangle = \langle 1 | H_{n',n} | 1 \rangle$, usando a equação (7) fica:

$$\begin{aligned} \langle 1, n' | H | 1, n \rangle &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle 1, n' | | 1, n + 1 \rangle + \langle 1, n' | | 1, n - 1 \rangle] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle 1, n' | | 2, n \rangle + \langle 1, n' | | 0, n \rangle] + \left(\frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{1,n}\right) \langle 1, n' | | 1, n \rangle \end{aligned}$$

finalmente, obtemos:

$$\begin{aligned} \langle 1, n' | H | 1, n \rangle &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle 1, n' | | 1, n + 1 \rangle + \langle 1, n' | | 1, n - 1 \rangle] + \left(\frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{1,n}\right) \langle 1, n' | | 1, n \rangle \end{aligned}$$

A qual tem a mesma forma da matriz dada na equação (5), agora com índice transversal n como variável, por tratar-se de uma cadeia transversal com $m = 1$ [primeira cadeia transversal na Fig.3(a)]. As outras cadeias transversais serão definidas da mesma forma trocando $m = 1$ por $m = 2, m = 3, \dots$ e assim sucessivamente. Estas cadeias transversais tem energia *hopping* dada por $t_y = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right)$. A energia de sítio para cada uma das cadeias transversais definidas com o índice m será:

$$\epsilon_s = \frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{m,n}$$

onde a energia potencial $V_{m,n}$ está associada ao potencial local externo de alguma impureza, ou ao potencial de confinamento gerado artificialmente pelas técnicas de *split gate*.

Desta forma, a representação de cadeias transversais será realizada através da definição de cadeias com índices longitudinais m , e, para cada uma destas cadeias, teremos uma quantidade n de sítios transversais correspondentes [ver Fig.3(a)].

As submatrizes fora da diagonal estarão associadas com energias *hopping* entre as cadeias transversais. Por exemplo, usando a equação (7), o acoplamento entre as cadeias $m = 1$ e $m = 2$ (primeiros vizinhos) será dado pelas submatrizes $\langle 1, n' | H | 2, n \rangle$ e $\langle 2, n' | H | 1, n \rangle$. A primeira destas submatrizes será:

$$\begin{aligned} \langle 1, n' | H | 2, n \rangle &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle 1, n' | | 2, n + 1 \rangle + \langle 1, n' | | 2, n - 1 \rangle] + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}\right) [\langle 1, n' | | 3, n \rangle + \langle 1, n' | | 1, n \rangle] + \left(\frac{2\hbar^2}{m^* a^2} + V_{1,n}\right) \langle 1, n' | | 2, n \rangle \end{aligned}$$

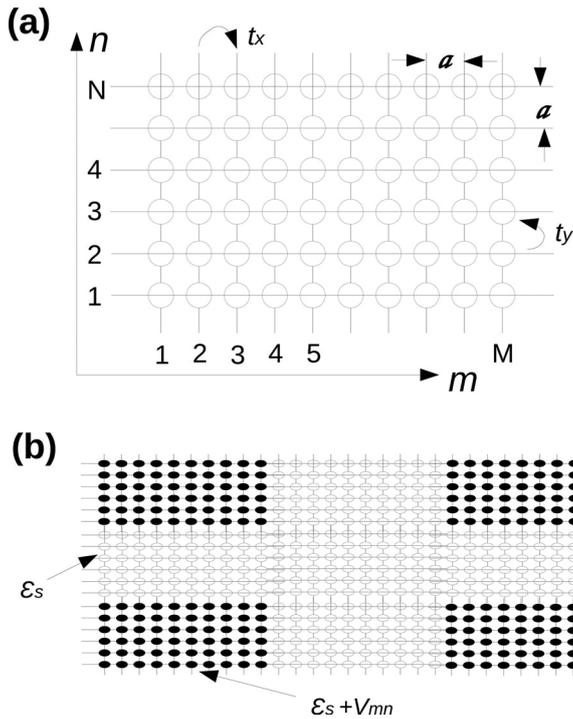


Figura 3: O procedimento de discretização da equação de Schrödinger significa discretizar o comportamento contínuo da função de onda. Esta discretização resulta num Hamiltoniano *Tight Binding*, o qual pode ser representado espacialmente como em (a). Onde os sítios da discretização são acoplados mediante energias *hopping* t_x e t_y . (b) Modelamento de uma caixa quântica aberta usando a rede *Tight Binding*, aqui os sítios em negrito representam barreiras de potencial geradas, de altura V_{mn} , por exemplo, usando técnicas de *split gate*.

eliminando os termos $\langle i, n' || j, f(n) \rangle$ com $i \neq j$ ficará:

$$\langle 1, n' | H | 2, n \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \right) [\langle 1, n' | 1, n \rangle]$$

o qual unicamente existe se $n' = n$, ou seja a submatriz $\langle 1, n' | H | 2, n \rangle$ é diagonal com termos na diagonal dados por $t_x = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \right)$.

A submatriz $\langle 2, n' | H | 1, n \rangle$ pode ser calculada da mesma forma para obtermos uma submatriz diagonal idêntica à anterior, dada por:

$$\langle 2, n' | H | 1, n \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \right) [\langle 2, n' | 2, n \rangle]$$

As submatrizes $\langle 2, n' | H | 3, n \rangle$ e $\langle 3, n' | H | 2, n \rangle$, $\langle 3, n' | H | 4, n \rangle$,etc, que são as matrizes que respectivamente acoplam as cadeias $m = 2$ e $m = 3$, $m = 3$ e $m = 4$, e, assim, sucessivamente, também são matrizes diagonais como as anteriores.

Por outro lado, as submatrizes $\langle 1, n' | H | 3, n \rangle$, $\langle 3, n' | H | 1, n \rangle$, $\langle 1, n' | H | 4, n \rangle$, etc, associadas com o acoplamento entre cadeias transversais de segundos vizinhos, terceiros vizinhos,etc, são matrizes que possuem todos elementos iguais a zero, resultado este que pode ser obtido através da equação (7).

Como exemplo, para um sistema de 3 cadeias transversais ($m = 1, m = 2$ e $m = 3$) com 3 sítios cada ($n = 1, n = 2$ e $n = 3$), isto é, uma caixa quadrada de 3×3 sítios, o número de elementos da matriz Hamiltoniana *Tight Binding* H será $(3 \times 3)^2 = 81$. Esta Hamiltoniana na representação de cadeias transversais tem a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \left(\begin{matrix} \epsilon_s^{1,1} & t_y & 0 \\ t_y & \epsilon_s^{1,2} & t_y \\ 0 & t_y & \epsilon_s^{1,3} \end{matrix} \right) & \begin{pmatrix} t_x & 0 & 0 \\ 0 & t_x & 0 \\ 0 & 0 & t_x \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} t_x & 0 & 0 \\ 0 & t_x & 0 \\ 0 & 0 & t_x \end{pmatrix} & \left(\begin{matrix} \epsilon_s^{2,1} & t_y & 0 \\ t_y & \epsilon_s^{2,2} & t_y \\ 0 & t_y & \epsilon_s^{2,3} \end{matrix} \right) & \begin{pmatrix} t_x & 0 & 0 \\ 0 & t_x & 0 \\ 0 & 0 & t_x \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} t_x & 0 & 0 \\ 0 & t_x & 0 \\ 0 & 0 & t_x \end{pmatrix} & \left(\begin{matrix} \epsilon_s^{3,1} & t_y & 0 \\ t_y & \epsilon_s^{3,2} & t_y \\ 0 & t_y & \epsilon_s^{3,3} \end{matrix} \right) \end{pmatrix}$$

A energia de sítio, $\epsilon_s^{m,n}$, na diagonal principal, permite identificarmos as 3 cadeias transversais ($m = 1, m = 2$ e $m = 3$). Este número de cadeias resulta em um conjunto de 3×3 submatrizes na Hamiltoniana. Para $m = 1$, temos a primeira cadeia transversal associada com a submatriz $\langle 1, n' | H | 1, n \rangle$ localizada na parte superior esquerda do bloco diagonal. Esta submatriz é de ordem de 3×3 por ser uma cadeia com 3 sítios transversais. A submatriz na parte central da matriz H , por sua vez, está associada com a segunda cadeia transversal, $m = 2$, definida por $\langle 2, n' | H | 2, n \rangle$ e também localizada no bloco diagonal de H . Finalmente, temos a submatriz $\langle 3, n' | H | 3, n \rangle$ para $m = 3$, associada com a terceira cadeia transversal e que se encontra na parte inferior direita do bloco diagonal. Os sítios n destas cadeias transversais são acoplados mediante as energias de *hopping* t_y . Por outro lado, os acoplamentos entre estas cadeias transversais estão dados pelas submatrizes $\langle 1, n' | H | 2, n \rangle$, $\langle 2, n' | H | 1, n \rangle$, $\langle 2, n' | H | 3, n \rangle$ e $\langle 3, n' | H | 2, n \rangle$, as quais são submatrizes diagonais que possuem as energias *hopping* t_x , como elementos de matriz.

$$t_x = t_y = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$$

Assim, a matriz *Tight Binding* (para o caso 2D) deduzida a partir da equação de Schrödinger é uma matriz de blocos tridiagonais [7, 22]. Nesta matriz, o bloco diagonal é formado pelas cadeias transversais e os blocos secundários são as submatrizes que conectam longitudinalmente às cadeias transversais.

Na Fig.3(a) temos uma representação de M cadeias transversais com N sítios cada. Para esta situação, a matriz *Tight Binding* tem $(M \times N)^2$ elementos de matriz e cada sítio é definido por uma energia $\epsilon_o = \frac{2\hbar^2}{m^* a^2}$ associada ao fundo da banda de condução. As energias de *hopping* são t_x (longitudinal) e t_y (vertical), com um parâmetro de rede dado por a . Por outro lado, do ponto de vista experimental, quando utilizamos técnicas de *split gate*, um sítio pode alterar sua energia para $\epsilon_s = \epsilon_o + V_{m,n}$. Isto permite gerar barreiras de potencial com altura $V_{m,n}$ e formar diferentes geometrias de confinamento. Um exemplo deste manejo pode ser visualizado na Fig.3(b). Nesta Figura, os sítios modificados

estão em negrito e distribuídos para formar, por exemplo, uma caixa quadrada aberta. Em geral, dependendo do número de sítios podemos modelar qualquer geometria de confinamento, e, isto é importante, entre outros, no estudo dos bilhares quânticos. Por fim, tudo o que tratamos neste trabalho também pode ser estendido para sistemas tridimensionais (3D), inclusão de impurezas ou desordens no sistema, assim como para a inclusão dos efeitos de um campo magnético aplicado externamente.

Como comentário adicional, a forma das matrizes resultantes é conhecida como Toeplitz, em homenagem ao matemático que as estudou. As matrizes Toeplitz tridiagonais tem solução dos autovalores, e nesse caso resultam nos conhecidos resultados das bandas do modelo de tight-binding [25].

Agradecimentos

Os autores agradecem o financiamento da Universidade Federal do ABC (UFABC) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

Referências

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley & Sons, New York, 2005), 8^a ed.
- [2] N. Ashcroft e N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, Fort Worth, 1976).
- [3] I.S. Oliveira e V.L.B. de Jesus, *Introdução a Física do Estado Sólido* (Editora Livraria da Física, 2005).
- [4] H. Ibach e H. Lüth, *Solid-State Physics* (Springer, Berlin, 2009) 4^a ed.
- [5] J.H. Davies, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [6] D.J. BenDaniel e C.B. Duke, Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
- [7] D.K. Ferry e S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [8] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, New York, 1995).
- [9] T.C.L.G. Sollner, W.D. Goodhue, P.E. Tannenwald, C.D. Parker e D.D. Peck, Appl. Phys. Lett. **43**, 588 (1983).
- [10] R. Tsu e L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [11] H. Yamamoto, H. Sano, Y. Kanie e K. Taniguchi, Superlattices and Microstructures **13**, 29 (1993).
- [12] X.B. Zhao e H. Yamamoto, Phys. Stat. Sol. B **214**, 35 (1999).
- [13] M. Mendoza e P.A. Schulz, Phys. Rev. B **68**, 205302 (2003).
- [14] M. Mendoza e S. Ujevic, J. Phys. Condens. Matter **24**, 235302 (2012).
- [15] T.J. Thornton, Rep. Prog. Phys. **57**, 311 (1994).
- [16] J. Göres, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer e M.A. Kastner, Phys. Rev. B **62**, 2188 (2000).
- [17] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, New York, 1997).
- [18] T. Ando, Y. Arakawaa, K. Furuya, S. Komiyama e H. Nakashima, *Mesoscopic Physics and Electronics* (Springer, Berlin, 1998).
- [19] S. Datta e B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [20] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, New Jersey, 1977), v. 1.
- [21] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, Boston, 1995).
- [22] S. Ujevic e M. Mendoza, Phys. Rev. B **82**, 035432 (2010).
- [23] J. Stewart, *Calculus: Early Transcendentals* (Brooks/Cole Cengage Learning, Belmont, 2012) 7^a ed.
- [24] M. Rossmannith, K. Syassen, E. Böckenhoff, K. Ploog e K. von Klitzing, Phys. Rev. B **44**, 3168 (1991).
- [25] A. Böttcher e B. Silbermann, *Introduction to Large Truncated Toeplitz Matrices* (Springer, New York, 1999).