UNIVERSITEIT ANTWERPEN

BACHELORPROEF

FACULTEIT WETENSCHAPPEN
DEPARTEMENT FYSICA

Quantumtunneling in tweedimensionale materialen met een node lijn

Promotor
Prof. Dr. F. PEETERS

Auteur
Sjoukje VEYT

Begeleider
Dr. B. VAN DUPPEN

Academiejaar 2018 – 2019

Inhoudsopgave

1 Inleiding **3**

2 Tweedimensionaal elektronengas: de Schrödingervergelijking **4**
2.1 Eendimensionale potentiaalstap 4
2.2 Eendimensionale potentiaalbarrière 7

3 Elektronen in grafeen: de Diracvergelijking **9**
3.1 Theoretische achtergrond grafeen 9
3.2 Vrij deeltje 10
3.3 Eendimensionale potentiaalstap 11
3.4 Eendimensionale potentiaalbarrière 14

4 Borofeen **17**
4.1 Theoretische achtergrond borofeen 17
4.2 Vrij deeltje 18
4.3 Eigenwaarden van de Hamiltoniaan 19
4.4 Effect van de verschillende parameters op het gedrag van de energie . . . 21
4.5 Node lijn 23
4.6 Eendimensionale potentiaalstap met translatie-symmetrie in de y-richting 24
4.6.1 Het gedrag van k_x in functie van de energiewaarden 24
4.6.2 Golffunctie 26
4.6.3 Stroomdichtheid 27
4.6.4 Transmissiewaarschijnlijkheid 28
4.7 Eendimensionale potentiaalstap met translatie-symmetrie in de x-richting 30
4.7.1 Het gedrag van k_y in functie van de energiewaarden 31
4.7.2 Golffunctie 32
4.7.3 Stroomdichtheid 33
4.7.4 Transmissiewaarschijnlijkheid 34

5 Conclusies **37**

6 Dankwoord **38**

Abstract

In this work, bilayer hexagonal borophene, will be of central importance. Two-dimensional bilayer borophene exhibits some interesting properties, such as flexibility and strength. This material is thus, following the example of graphene, a very fascinating topic. The transmission properties through a potential step in this topological semimetal, whose energy spectrum exhibits a nodal line, will be investigated in this work. These results are compared to the transmission properties exhibited by graphene, a material that is described by a Dirac Hamiltonian and to the transmission properties of a two-dimensional, Schrödinger electron gas.

Furthermore, special attention is given to the behaviour of the eigenvalues of the Hamiltonian[2] that describes this system. These eigenvalues have a trigonal symmetry, which is affected by the modification of the parameters $\frac{1}{m_e}$ (the inverse mass parameter) and v_e (the group velocity of the electrons). The value of these parameters determines the relative importance of the contribution of the Schrödinger and of the Dirac part.

Contour plots of the eigenvalues as a function of the longitudinal and transversal components of the wave vector show that the trigonal symmetry gives way to a spherical symmetry when decreasing the inverse mass and when decreasing or increasing the velocity parameter.

Analytical expressions of the transmission probabilities of a potential step with translational symmetry in the y direction and of a potential step with translational symmetry in the x direction will be calculated. Only the case of normal incidence will be taken into account. The plots show that, when modificating the parameters in such a way that the Schrödinger part is dominant, the transmission probability will exhibit the same properties as the probability that was calculated for the two-dimensional electron gas: the energy has to be large enough (i.e. the energy has to exceed the height of the potential step) for the probability to differ from zero. If the Dirac part prevails over the Schrödinger part, the transmission probability equals one, irrespective of the energy value. This phenomenon is known as Klein tunneling.

The Hamiltonian of bilayer hexagonal borophene is a combination of the two. As a consequence, it's interesting to consider the case where both parameters have a contribution. Plots of the transmission probability will be a mixture of the two extremes.

Because of the trigonal symmetry and the fact that the system does not exhibit (x, y)-symmetry, the results for the problem with translational symmetry in the y direction differ from the results for the problem with translational symmetry in the x direction. When, for example, both parameters, m_e and v_e have the same weight, the plot that corresponds to the symmetry in the y direction will mainly exhibit Schrödinger behaviour, while the results corresponding to the symmetry in the x direction in this specific case mainly exhibit Dirac behaviour.

1 Inleiding

In de eerste twee delen van dit werk zal de transmissiewaarschijnlijkheid onderzocht worden voor zowel het tweedimensionale elektronengas, een probleem dat beschreven kan worden aan de hand van de Schrödingervergelijking, als voor het geval van grafeen, waarbij het gedrag van de elektronen beschreven wordt door de Diracvergelijking. In beide gevallen wordt enerzijds gekeken naar een potentiaalstap en anderzijds naar een potentiaalbarrière. Voor deze systemen wordt de golffunctie berekend, op basis waarvan de transmissiewaarschijnlijkheid analytisch bepaald kan worden. Deze waarschijnlijkheid wordt dan geplot, teneinde in staat te zijn een fysische interpretatie bij de resultaten te verschaffen.

Deze resultaten zullen dienen als basis voor het volgende onderdeel, omtrent het materiaal borofeen, opdat er steeds als het ware een basis zou zijn om naar terug te grijpen, met als doel de fysica achter de uiteindelijk bekomen resultaten volkomen te begrijpen en te kunnen vergelijken met eerder genoemde, eenvoudigere gevallen.

De Hamiltoniaan die het gedrag van de elektronen in een dubbellaag borofeen beschrijft, zal bovendien als het ware een combinatie blijken te zijn van de Schrödinger- en de Dirac-Hamiltoniaan. Bijgevolg kunnen de eerste twee delen van dit werk beschouwd worden als een uitwerking van de 'limietgevallen'; er wordt ten eerste onderzocht wat er gebeurt als in de borofeen-Hamiltoniaan de parameters die aanleiding geven tot Dirac-gedrag naar nul gaan en vervolgens wordt het zuivere Dirac-geval onderzocht, met andere woorden, de Schrödinger-parameters worden gelijkgesteld aan nul.

Tot slot wordt dan beschreven wat er gebeurt als geen van beide gevallen wordt uitgesloten en hoe het gedrag der elektronen beïnvloed wordt door de combinatie te beschouwen.

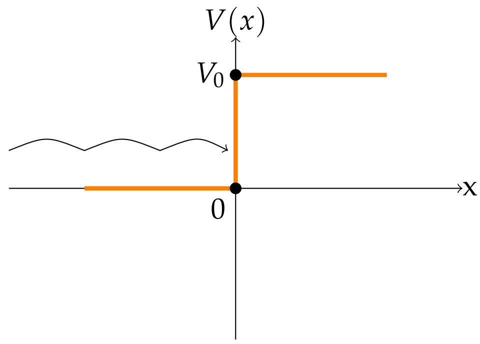
Het is interessant om het materiaal borofeen van naderbij te beschouwen, aangezien het net als grafeen beschikt over enkele belangrijke eigenschappen, zoals elasticiteit en sterkte[1]. Bovendien behoort borofeen tot de groep der topologische semimetalen[2]; elektronische fasen zonder bandgap waarvan de conductie- en valentiebanden kruisingen vertonen die topologisch stabiel zijn[3]. Het is nuttig om tweedimensionale topologische semimetalen te onderzoeken, omdat deze materialen een belangrijke rol spelen bij de ontwikkeling van nieuwe quantum-apparaten[2].

Concreet zal in de eerste sectie het probleem van het tweedimensionaal elektronengas opgelost worden. Er wordt een transmissiewaarschijnlijkheid berekend voor de eendimensionale potentiaalstap en vervolgens voor de eendimensionale potentiaalbarrière. De tweede sectie behandelt het geval van grafeen. Ook hier wordt de transmissie onderzocht voor een potentiaalstap en -barrière. In de derde en laatste sectie wordt borofeen beschouwd. Er wordt dieper ingegaan op de structuur van het materiaal, waarna de karakteristieken van de eigenwaarden van de Hamiltoniaan besproken worden. Ook hier wordt de transmissiewaarschijnlijkheid berekend, voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de y-richting enerzijds en voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting anderzijds.

2 Tweedimensionaal elektronengas: de Schrödingervergelijking

2.1 Eendimensionale potentiaalstap

Beschouw in eerste instantie onderstaande schets van de eendimensionale potentiaalstap.



Figuur 1: Een eendimensionale potentiaalstap met hoogte V_0.

Veronderstel dat het te onderzoeken systeem voldoet aan de Schrödingervergelijking. Om een uitdrukking voor de transmissiewaarschijnlijkheid te bekomen, wordt eerst de golffunctie berekend.

De golffunctie moet voldoen aan de stationaire (tweedimensionale) Schrödingervergelijking:

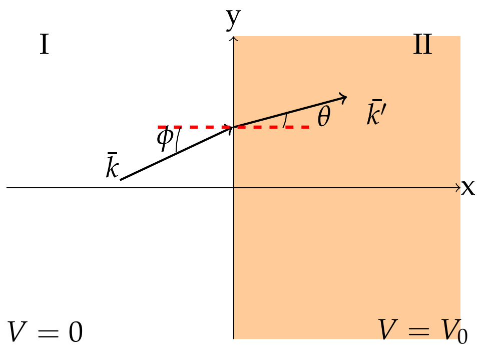
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\Psi + V(x,y)\Psi = E\Psi. \tag{1}$$

Waarbij voor de potentiaal $V(x,y)$ geldt:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & x > 0. \end{cases} \tag{2}$$

Aangezien het systeem translatie-invariant is in de y-richting, kan de methode van Scheiding der Variabelen worden toegepast. In de y-richting is het deeltje niet onderhevig aan een potentiaal. Bijgevolg stelt het y-afhankelijk gedeelte de golffunctie voor van een vrij deeltje. De berekening van de coëfficiënten berust op continuïteit van de golffunctie en haar eerste afgeleide in het punt $x = 0$:

$$\Psi(x,y) \quad = \quad \begin{cases} a_1[e^{ik_x x}e^{ik_y y} + \frac{k_x-\kappa_x}{k_x+\kappa_x}e^{-ik_x x}e^{ik_y y}] & x < 0, \\ a_1\frac{2k_x}{k_x+\kappa_x}e^{i\kappa_x x}e^{ik_y y} & x > 0. \end{cases} \tag{3}$$



Figuur 2: Schematische voorstelling van de breking van een golf aan een eendimensionale potentiaalstap met hoogte V_0.

Zoals te zien in figuur 2 gelden volgende relaties voor de golfvectoren:

$$\begin{cases} k_x &= k\cos\phi, \\ k_y &= k\sin\phi, \end{cases} \tag{4}$$

$$\begin{cases} \kappa_x &= k'\cos\theta, \\ k_y &= k'\sin\theta. \end{cases} \tag{5}$$

De y-component van de golfvector is een behouden grootheid, omwille van de translatiesymmetrie in de y-richting. Verder gelden ook, volgend uit de Schrödingervergelijking, volgende relaties tussen energie en golfvectoren:

$$\begin{cases} k^2 &= k_x^2 + k_y^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}E, \\ k'^2 &= \kappa_x^2 + k_y^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - V). \end{cases} \tag{6}$$

De reflectiewaarschijnlijkheid kan nu eenvoudig gevonden worden:

$$\begin{aligned} R &= |r|^2, \\ &= |\frac{k_x - \kappa_x}{k_x + \kappa_x}|^2. \end{aligned} \tag{7}$$

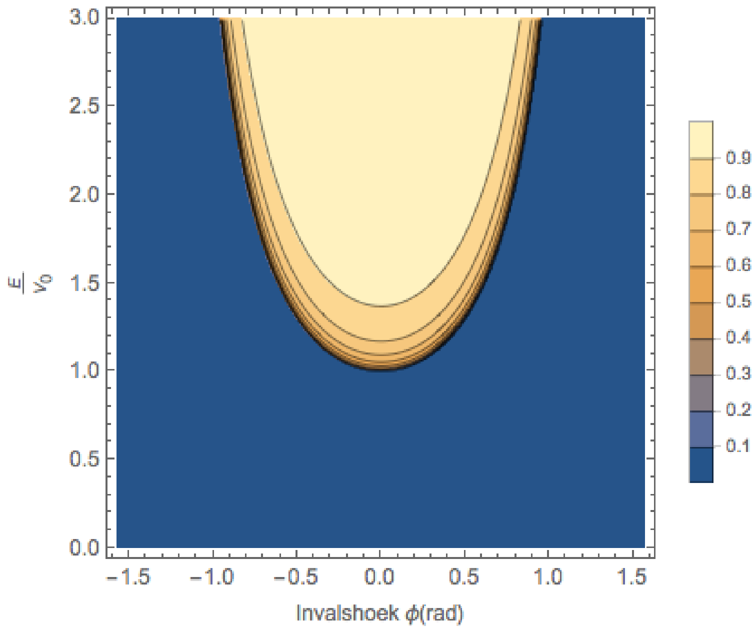
Voor de transmissiewaarschijnlijkheid komt er dan:

$$\begin{aligned} T &= 1 - R, \\ &= \frac{4k_x\kappa_x}{(k_x + \kappa_x)^2}, \\ &= \frac{4\sqrt{E(E\cos^2\phi - V_0)}\cos\phi}{2E\cos^2\phi - V_0 + 2\sqrt{E(E\cos^2\phi - V_0)}\cos\phi}. \end{aligned} \tag{8}$$

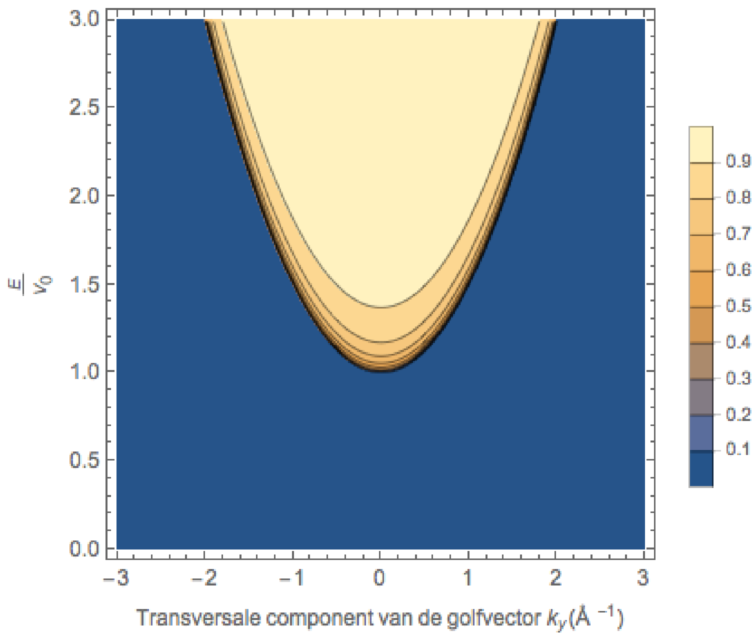
Bovenstaande uitdrukking is geldig op voorwaarde dat zowel k_x als κ_x reëel zijn. Dit is het geval als $E\cos^2\phi (= E_x) > V_0$. Indien niet, zal κ_x imaginair zijn en dan geldt voor reflectie en transmissie:

$$R = 1, \tag{9}$$
$$T = 1 - R = 0. \tag{10}$$

De resultaten voor de transmissiewaarschijnlijkheid werden geplot in volgende figuren. De eerste plot toont de transmissie in functie van de energie en de invalshoek, ϕ. In de tweede plot wordt ervoor geopteerd de invalshoek te vervangen door de y-component van de golfvector, die evenals de energie een behouden grootheid is.



Figuur 3: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met hoogte V_0 in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de invalshoek ϕ.

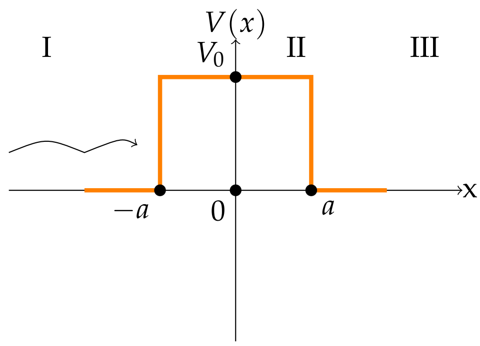


Figuur 4: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met hoogte V_0 in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de transversale component van de golfvector k_y.

Men kan opmerken dat de transmissiewaarschijnlijkheid identisch gelijk is aan nul indien de waarde van de energie kleiner is dan de hoogte van de potentiaalstap, zijnde V_0. De golfvector wordt dan complex, waardoor overgang optreedt van een propagerende naar een exponentieel dalende functie. Voor een energie die groter is dan de potentiaal, $E > V_0$ (i.e. $\frac{E}{V_0} > 1$), varieert de transmissiewaarschijnlijkheid in functie van de invalshoek. In dit geval bestaat er een kritische invalshoek: bij loodrechte inval op de potentiaalstap zal geen reflectie optreden. Voor een invalshoek $\phi = \frac{\pi}{2}$ (i.e. de golf loopt evenwijdig aan de stap) geldt dat de transmissiewaarschijnlijkheid gelijk is aan nul.

2.2 Eendimensionale potentiaalbarrière

Volledig analoog kan nu het geval van de potentiaalbarrière (i.e. een potentiaalstap met eindige breedte) uitgewerkt worden.



Figuur 5: Een eendimensionale potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $2a$.

Wederom wordt een schets van de situatie getoond, die beschreven wordt door volgende vergelijkingen:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}]\Psi + V(x,y)\Psi = E\Psi, \tag{11}$$

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < -a, \\ V_0 & -a < x < +a, \\ 0 & x > +a. \end{cases} \tag{12}$$

Teneinde de golffunctie te berekenen, wordt ditmaal geopteerd voor de transfermatrixmethode[4]. Evenals in de vorige sectie, wordt gebruik gemaakt van de voorwaarde van continuïteit van de golffunctie en de eerste afgeleide van de golffunctie, in de punten $x = -a$ en $x = +a$. De golffunctie en bijhorende golfvector zien er dan als volgt uit:

$$\psi_{x,j} = a_j e^{ik_j x} + b_j e^{-ik_j x}, \tag{13}$$

$$k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_x - V_j)}. \tag{14}$$

De indices geven weer om welk gebied van de barrière het gaat. Deze gebieden werden ook genummerd op bijgaande figuur (figuur 5). De coëfficiënt $b_3 = 0$, omdat de golf langs links invalt. Uit de transfermatrixmethode haalt men dan de relaties tussen de verschillende coëfficiënten.

$$\vec{u}_1 = T^{(1)}.\vec{u}_2, \tag{15}$$

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2k_1}\begin{bmatrix} (k_1+k_2)e^{i(k_1-k_2)a} & (k_1-k_2)e^{i(k_1+k_2)a} \\ (k_1-k_2)e^{-i(k_1+k_2)a} & (k_1+k_2)e^{i(k_2-k_1)a} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}. \tag{16}$$

En analoog bekomt men:

$$\vec{u_2} = T^{(2)}.\vec{u_3}, \tag{17}$$

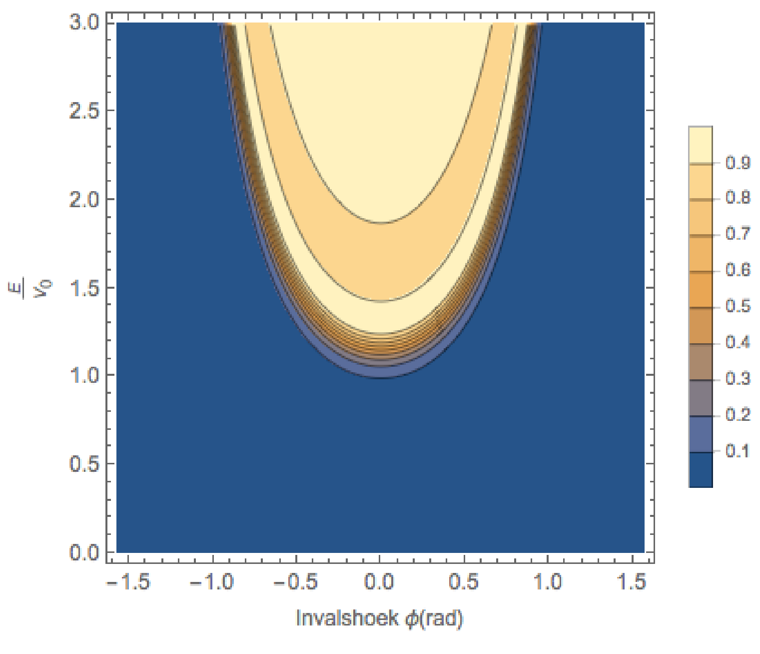
$$\begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2k_2} \begin{bmatrix} (k_1+k_2)e^{-i(k_2-k_1)a} & (k_2-k_1)e^{-i(k_1+k_2)a} \\ (k_2-k_1)e^{i(k_1+k_2)a} & (k_1+k_2)e^{-i(k_1-k_2)a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Hieruit volgt het verband tussen de coëfficiënten met respectievelijk indices 1 en 3. Hierbij kan de matrix M gedefinieerd worden, waarvan de elementen de nodige informatie verschaffen om de transmissiewaarschijnlijkheid te berekenen:

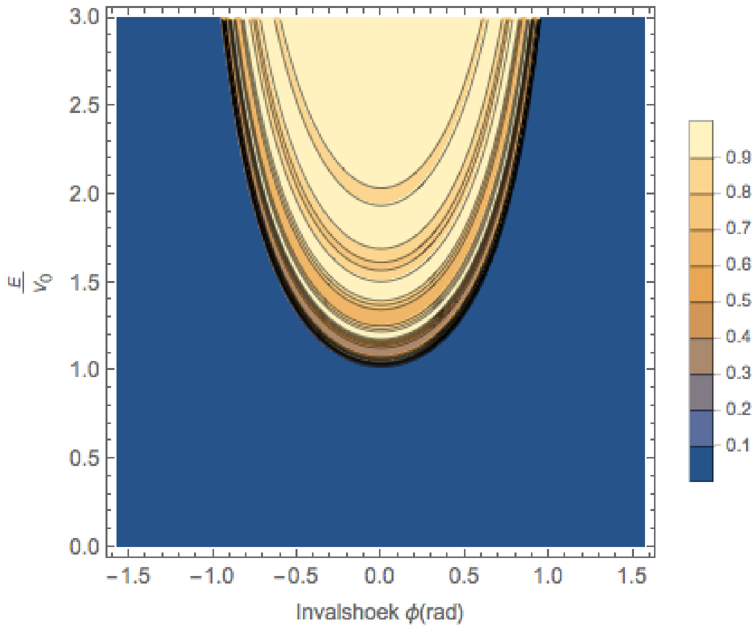
$$\Rightarrow \vec{u_1} = T^{(1)}T^{(2)}\vec{u_3} = M\vec{u_3}, \tag{19}$$

$$\begin{aligned} R &= \frac{|M_{21}|^2}{|M_{11}|^2}, \\ T &= \frac{1}{|M_{11}|^2}, \\ &= \frac{1}{1+\sin^2(2k_{x,2}a)\frac{(k_x^2-k_{x,2}^2)^2}{4k_x^2k_{x,2}^2}}, \\ &= \frac{1}{1+\sin^2(2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E\cos^2\phi-V_0)}a)\frac{((\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E\cos^2\phi})^2-(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E\cos^2\phi-V_0)})^2)^2}{4(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E\cos^2\phi})^2(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E\cos^2\phi-V_0)})^2}}. \end{aligned} \tag{20}$$

Ook dit resultaat wordt geplot. De twee plots worden gemaakt in functie van de energie en de invalshoek, ϕ, waarbij de breedte van de barrière in de tweede plot groter wordt genomen.



Figuur 6: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $L = 2a = 4\ nm$ in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de invalshoek ϕ.



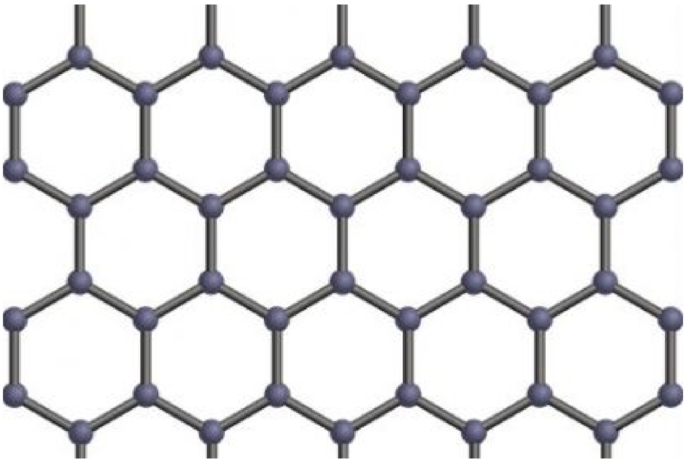
Figuur 7: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $L = 2a = 10\ nm$ in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de invalshoek ϕ.

Voor de potentiaalbarrière zijn er twee te variëren parameters: in de eerste plaats de hoogte van de barrière, V_0, en daarnaast de breedte van de barrière. Dit in tegenstelling tot de potentiaalstap, waar enkel de staphoogte optrad als parameter. Op zekere plaatsen in de plots zijn resonanties te bemerken. Het is deze keer niet zo dat vanaf een voldoende hoge energie de transmissiewaarschijnlijkheid gelijk is aan één. De resonanties bevinden zich op specifieke posities, namelijk op de plaatsen waarvoor geldt dat de dikte van de barrière een geheel veelvoud is van de golflengte der invallende golf. Onder deze voorwaarde vormen de elektronen een staande golf in de barrière.

3 Elektronen in grafeen: de Diracvergelijking

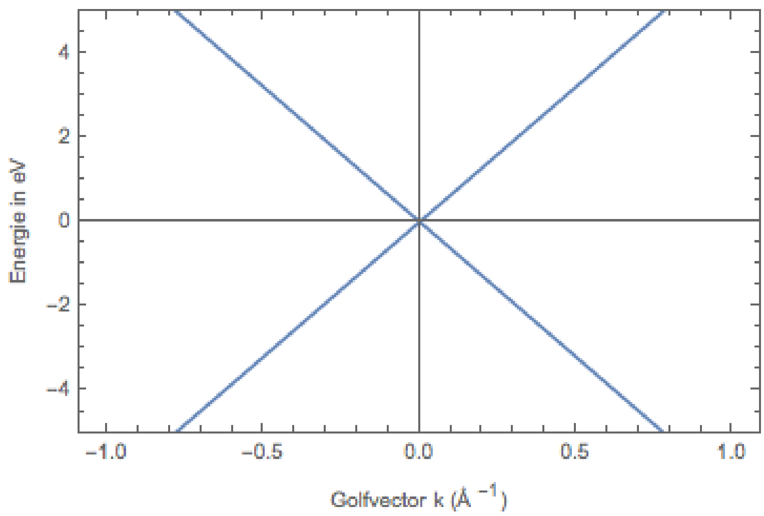
3.1 Theoretische achtergrond grafeen

In deze sectie wordt dieper ingegaan op de tunnelingseigenschappen van elektronen in een materiaal dat kan gemodelleerd worden met een Dirac-Hamiltoniaan, zoals grafeen. Grafeen is niets anders dan één enkele atoomlaag van het materiaal grafiet, dat vooral bekend is als het materiaal waaruit een potloodpunt gemaakt is. In grafiet zijn de verschillende grafeenlagen aan elkaar gebonden door de van der Waals-krachten. De configuratie van de koolstofatomen in grafeen is hexagonaal, zoals geïllustreerd in figuur 8. Omwille van het feit dat grafeen over enkele interessante eigenschappen beschikt, waaronder de sterkte, de ondoordringbaarheid en de elasticiteit, zijn er reeds vele toepassingen waarbij gebruikt wordt gemaakt van dit materiaal.[5][6]



Figuur 8: Weergave van de hexagonale configuratie van de koolstofatomen in grafeen.[7]

Opmerkelijk zijn bovendien de elektronische eigenschappen die grafeen heeft, omwille van de speciale vorm van de bandenstructuur en de afwezigheid van de bandkloof. De hexagonale configuratie van de koolstofatomen geeft aanleiding tot een lineair verband tussen de energie en de golfvector. Dit wordt grafisch weergegeven in figuur 9. De afwezigheid van de bandkloof leidt ertoe dat grafeen dient gedopeerd te worden, indien men de geleidbaarheid wenst te verhogen. De lineariteit van de dispersierelatie leidt er dan weer toe dat het gedrag van de elektronen ditmaal niet wordt beschreven door de Schrödingervergelijking. In deze situatie moet gebruik gemaakt worden van de tweedimensionale Diracvergelijking, aangezien de effectieve massa van de deeltjes gekarakteriseerd wordt door de kromming van de banden, die in dit geval nul blijkt te zijn.[8]



Figuur 9: Weergave van het lineair verband tussen de energiewaarden en de waarden van de golfvector, k, voor grafeen.

3.2 Vrij deeltje

De beschrijving van het gedrag van elektronen in grafeen gebeurt, zoals gezegd, niet langer met de Schrödingervergelijking. Men dient nu over te stappen op de vergelijking van Dirac voor een deeltje met rustmassa nul, wat concreet betekent dat met onderstaande Hamiltoniaan (vergelijking (21)) gewerkt zal worden:

$$\hat{H} = v_f \vec{p}.\vec{\sigma}. \tag{21}$$

Hierbij stelt v_f de Fermi-snelheid voor. De energie van het hoogst gevulde energieniveau van een deeltje dat zich in een systeem bevindt waarvan de temperatuur dichtbij het absolute nulpunt ligt, wordt de Fermi-energie genoemd. De Fermi-snelheid is dan de snelheid die overeenkomt met deze energie. Deze snelheid is van de orde van $10^6 m/s$. Er geldt verder voor de Pauli matrices:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{22}$$

De uiteindelijke vorm van de Hamiltoniaan wordt dan:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= v_f \begin{bmatrix} 0 & \hat{p_x} - i\hat{p_y} \\ \hat{p_x} + i\hat{p_y} & 0 \end{bmatrix}, \\ &= v_f \begin{bmatrix} 0 & \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \hbar\frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \hbar\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{23}$$

Voor een vrij deeltje kan de golffunctie berekend worden uit vergelijking (24), gebruik makend van de translatie-invariantie van het te onderzoeken systeem:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \tag{24}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Psi &= \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} e^{i\vec{k}.\vec{r}}, \\ &= \phi_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{v_f\hbar}{E}(k_x + ik_y) \end{bmatrix} e^{ik_x x} e^{ik_y y}. \end{aligned} \tag{25}$$

Ook het verband tussen golfvector, k, en de energie wordt uitgerekend. De resultaten zijn dan de volgende:

$$\begin{aligned} k^2 &= k_x^2 + k_y^2 = \frac{E^2}{v_f^2\hbar^2}, \\ \Rightarrow E &= \pm v_f \hbar k. \end{aligned} \tag{26}$$

Hierbij dient in acht genomen te worden dat de energie negatief kan zijn. Negatieve energiewaarden corresponderen met de energie van de gaten.

3.3 Eendimensionale potentiaalstap

De eendimensionale potentiaalstap wordt beschreven door onderstaande Hamiltoniaan:

$$\hat{H} = v_f \vec{p}.\vec{\sigma} + V(x,y) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{27}$$

Hierbij geldt:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & x > 0. \end{cases} \tag{28}$$

De golffunctie van het systeem dat in deze sectie bekeken wordt, moet bijgevolg voldoen aan volgende vergelijking:

$$v_f\hbar \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} + V \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}. \tag{29}$$

Het systeem kent opnieuw translatie-invariantie in de y-richting, wat leidt tot het gebruik van de methode van Scheiding der Variabelen. Het y-afhankelijk gedeelte is dus weer de golffunctie van een vrij deeltje (aangezien het deeltje vrij is in de y-richting: $\Psi(x,y) = \Psi_x e^{ik_y y}$). Teneinde de coëfficiënten te berekenen, volstaat het gebruik te maken van de continuïteit van de golffunctie in het punt $x = 0$. In het gebied voor de potentiaalstap, waar de potentiaal gelijk is aan nul (d.i het gebied waarvoor $x < 0$), wordt de golffunctie gegeven door vergelijking (30). Voor $x > 0$ ondervindt het deeltje wel het effect van de potentiaal. In dit geval wordt de golffunctie gegeven door vergelijking (31):

$$\begin{aligned} \Psi &= \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = a_1 [\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{v_f\hbar}{E}(k_x + ik_y) \end{bmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} \\ &+ \frac{k_x(E-V_0) - E\kappa_x - ik_yV_0}{k_x(E-V_0) + E\kappa_x + ik_yV_0} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{-v_f\hbar}{E}(k_x - ik_y) \end{bmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)}], \end{aligned} \tag{30}$$

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = a_1 \frac{2k_x(E-V_0)}{k_x(E-V_0) + E\kappa_x + ik_yV_0} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{v_f\hbar}{E-V_0}(\kappa_x + ik_y) \end{bmatrix} e^{i(\kappa_x x + k_y y)}. \tag{31}$$

De golfvectoren voldoen aan onderstaande uitdrukkingen:

$$\begin{cases} k^2 = k_x^2 + k_y^2 = \frac{E^2}{v_f^2\hbar^2}, \\ k'^2 = \kappa_x^2 + k_y^2 = \frac{(E-V_0)^2}{v_f^2\hbar^2}. \end{cases} \tag{32}$$

Uitgaande van deze kennis kan men nu de reflectie- en transmissiewaarschijnlijkheid berekenen. Hiertoe wordt de golffunctie in de vorm van vergelijking (33) neergeschreven, opdat de reflectiecoëfficiënt, r, eenvoudig te herkennen zou zijn. Door normering is de coëfficiënt a_1 gelijk aan één:

$$\Psi = \begin{cases} a_1 [\begin{bmatrix} 1 \\ le^{i\phi} \end{bmatrix} e^{ik_x x} + r \begin{bmatrix} 1 \\ -le^{-i\phi} \end{bmatrix} e^{-ik_x x}] e^{ik_y y} & x < 0, \\ a_1 t \begin{bmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{bmatrix} e^{i\kappa_x x} e^{ik_y y} & x > 0. \end{cases} \tag{33}$$

De 'l' in vergelijking (33) stelt het teken van de energie voor. De continuïteit van de golffunctie in $x = 0$ wordt nu aangewend, waaruit men twee vergelijkingen kan halen. Deze verschaffen een uitdrukking voor de reflectiecoëfficiënt, r, aan de hand waarvan dan de analytische uitdrukkingen voor de reflectiewaarschijnlijkheid R en de transmissiewaarschijnlijkheid T bekomen worden. Hierbij kan opgemerkt worden dat het niet noodzakelijk is dat de eerste afgeleide van de golffunctie continu is, aangezien in de Hamiltoniaan enkel een afgeleide van eerste orde voorkomt:

$$\Psi_L(0) = \Psi_R(0), \tag{34}$$

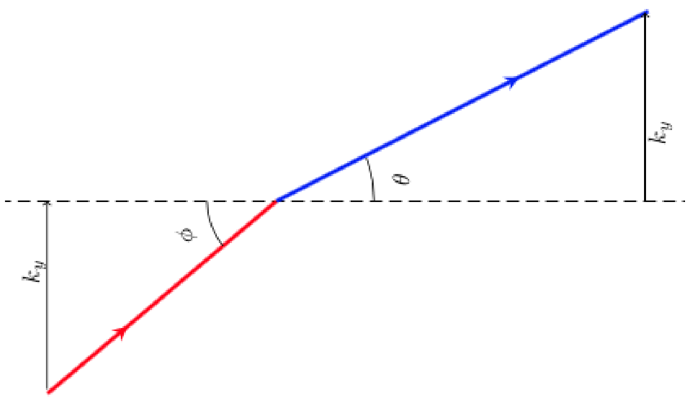
$$\Rightarrow \begin{cases} 1 + r = t, \\ le^{i\phi} - le^{-i\phi} = te^{i\theta}, \end{cases} \tag{35}$$

$$
\begin{aligned}
R &= |r|^2, \\
&= \frac{1 - l\cos(\phi - \theta)}{1 + l\cos(\phi + \theta)},
\end{aligned} \tag{36}
$$

$$
\begin{aligned}
T &= 1 - R, \\
&= \frac{2l\cos\phi\cos\theta}{1 + l\cos(\phi + \theta)}.
\end{aligned} \tag{37}
$$

Opdat de transmissie geschreven kan worden in functie van de energie E en de invalshoek ϕ, wordt gebruik gemaakt van het behoud van de grootheid k_y, wat neerkomt op toepassing van de wet van Snellius, afgebeeld in figuur 10:

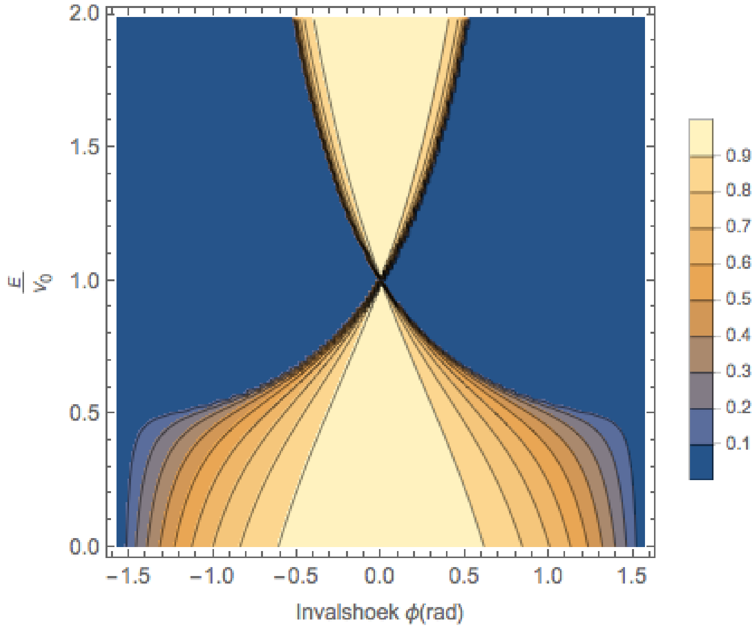
$$
\begin{aligned}
k_y &= k\sin\phi = \frac{E}{v_f\hbar}\sin\phi, \\
&= k'\sin\theta = \frac{|E - V_0|}{v_f\hbar}\sin\theta.
\end{aligned} \tag{38}
$$



Figuur 10: Schematische voorstelling van de breking van een golf aan een eendimensionale potentiaalbarrière, waarop de wet van Snellius wordt toegepast.

De transmissiewaarschijnlijkheid uit vergelijking (39) kan dan geplot worden, als functie van de energie en de invalshoek ϕ:

$$
T = \frac{2\cos\phi\cos\left(\arcsin\left(\frac{E}{E-V_0}\sin\phi\right)\right)}{1 + \cos\left(\phi + \arcsin\left(\frac{E}{E-V_0}\sin\phi\right)\right)}. \tag{39}
$$



Figuur 11: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met hoogte V_0 in grafeen, in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de invalshoek ϕ.

Kijkend naar figuur 11 valt op dat het bovenste gedeelte (vanaf $\frac{E}{V_0} = 1.0$) sterk gelijkt op de plot die bekomen werd in het Schrödingergeval. Het nulpunt van deze grafiek ligt ter hoogte van de waarde $\frac{E}{V_0} = 1$. Verder blijkt dat bij loodrechte inval op de potentiaalstap ($\phi = 0 \Rightarrow \theta = 0$) de transmissiewaarschijnlijkheid gelijk wordt aan één en bijgevolg is de kans op reflectie gelijk aan nul. Dit resultaat is onafhankelijk van de hoogte van de potentiaal en de waarde van de energie. Het fenomeen dat hier optreedt, is beter bekend onder de naam 'Klein tunneling'.
Uit de definitie van k_x blijkt dat er een kritische hoek bestaat. Dit is de hoek waarvoor geldt: $|k_y| > \frac{|E|}{v_f \hbar}$ of $|k_y| > \frac{|E-V_0|}{v_f \hbar}$. Er zal dan exponentiële uitdoving plaatsvinden in de potentiaalstap.

3.4 Eendimensionale potentiaalbarrière

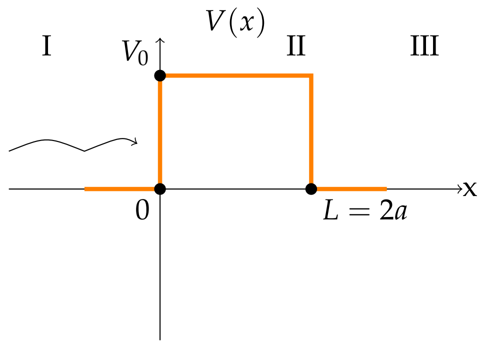
Een gelijkaardige procedure kan gevolgd worden om het resultaat van de transmissiewaarschijnlijkheid te bekomen in het geval van een barrière. De Hamiltoniaan komt overeen met de Hamiltoniaan uit de sectie over de potentiaalstap, alleen is het zo dat het voorschrift van de potentiaal wijzigt. Concreet krijgt men:

$$\hat{H}\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix} = v_f \hbar \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix} + V\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix} = E\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix}. \tag{40}$$

Met als voorschrift voor de potentiaal:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & 0 < x < 2a, \\ 0 & x > 2a. \end{cases} \tag{41}$$

Analoog aan het geval van het tweedimensionaal elektronengas worden de verschillende gebieden gedefinieerd in figuur 12.



Figuur 12: Een eendimensionale potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $L = 2a$.

De situatie leent zich uitstekend voor toepassing van de transfermatrixmethode. Dit levert de uitdrukkingen van de golffuncties in de verschillende delen van de barrière:

$$\begin{cases} \Psi_I &= \begin{bmatrix} e^{ik_{1,x}x} & e^{-ik_{1,x}x} \\ le^{i\phi}e^{ik_{1,x}x} & -le^{-i\phi}e^{-ik_{1,x}x} \end{bmatrix} e^{ik_y y} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}, \\ \Psi_{II} &= \begin{bmatrix} e^{ik_{2,x}x} & e^{-ik_{2,x}x} \\ le^{i\theta}e^{ik_{2,x}x} & -le^{-i\theta}e^{-ik_{2,x}x} \end{bmatrix} e^{ik_y y} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}, \\ \Psi_{III} &= \begin{bmatrix} e^{ik_{3,x}x} & e^{-ik_{3,x}x} \\ le^{i\chi}e^{ik_{3,x}x} & -le^{-i\chi}e^{-ik_{3,x}x} \end{bmatrix} e^{ik_y y} \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix}. \end{cases} \tag{42}$$

In bovenstaande vergelijking stelt 'l' het teken van de energie voor. De indices van de golfvectoren geven aan om welk gebied van de barrière het gaat. De longitudinale componenten van de golfvectoren voldoen aan

$$\begin{cases} k_{1,x} &= \frac{E}{v_f \hbar} \cos\phi, \\ k_{2,x} &= \frac{|E-V_0|}{v_f \hbar} \cos\theta, \\ k_{3,x} &= \frac{E}{v_f \hbar} \cos\chi. \end{cases} \tag{43}$$

Verder is het zo dat, aangezien de golf langs links invalt, coëfficiënt b_3 gelijk is aan nul. De transmissie kan weer onderzocht worden door te steunen op de continuïteit van de golffunctie aan de randen van de barrière. Er geldt namelijk:

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0) \tag{44}$$

en

$$\Psi_I(2a) = \Psi_{II}(2a). \tag{45}$$

Deze continuïteitsvoorwaarden aan begin en einde van de barrière geven aanleiding tot een matrixverband tussen de coëfficiënten. Uit dit verband haalt men de elementen van de transmissiematrix M. De concrete uitwerking wordt weergegeven door vergelijkingen ((46) en (47)) (veronderstel hierbij dat c de x-coördinaat van het punt van overgang vertegenwoordigt):

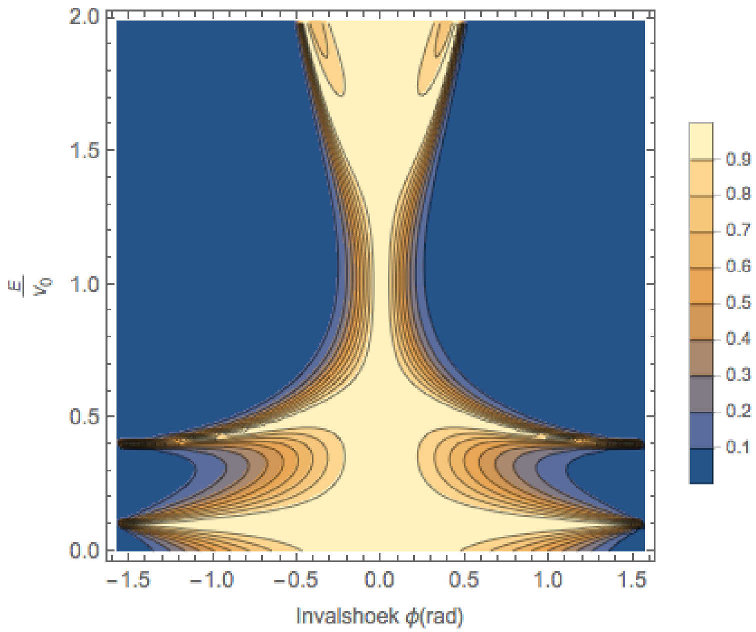
$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_{1,x}c} & e^{-ik_{1,x}c} \\ le^{i\phi}e^{ik_{1,x}c} & -le^{-i\phi}e^{-ik_{1,x}c} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_{2,x}c} & e^{-ik_{2,x}c} \\ le^{i\theta}e^{ik_{2,x}c} & -le^{-i\theta}e^{-ik_{2,x}c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}, \tag{46}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = M_{1\to 2} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}. \tag{47}$$

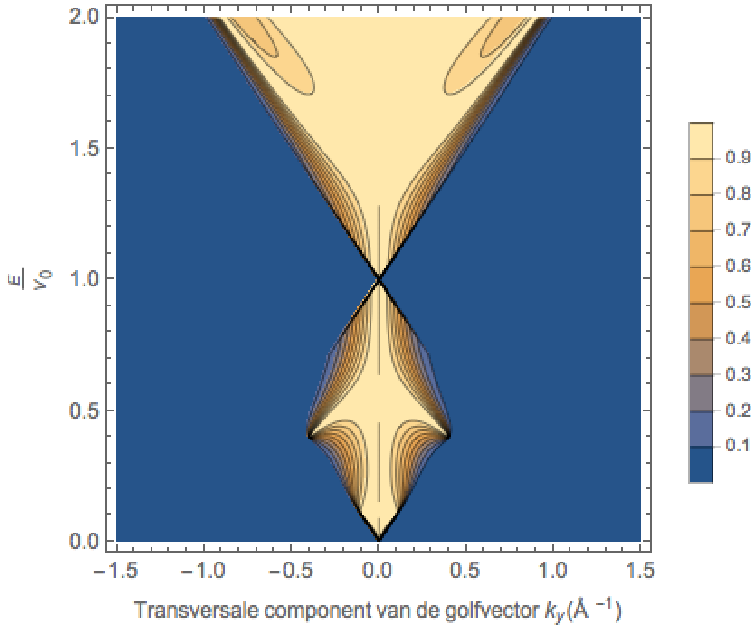
Door op de plaats van coördinaat c de x-coördinaat van begin en einde van de barrière te substitueren (respectievelijk $x = 0$ en $x = L$) bekomt men de uitdrukking van de transmissiematrix. De transmissiewaarschijnlijkheid wordt bijgevolg gegeven door vergelijking (48):

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{1}{|M_{11}|^2}, \\
&= [2\cos^2\theta\cos^2\phi]/ \\
&\quad [(1+\cos^2\theta\cos^2\phi+\sin^2\theta\sin^2\phi-2\sin\theta\sin\phi+ \\
&\quad (1-2\sin^2(k_2L))(-1+2\sin\theta\sin\phi+\cos^2\theta\cos^2\phi-\sin^2\theta\sin^2\phi)]. \qquad (48)
\end{aligned}
$$

Dit resultaat kan wederom grafisch voorgesteld worden. Dit resulteert in de plots die worden afgebeeld in figuren 13 en 14. In figuur 13 wordt de waarschijnlijkheid geplot in functie van de energie en de invalshoek, waar bij figuur 14 deze laatste grootheid vervangen wordt door de y-component van de golfvector. In beide gevallen wordt de breedte L van de barrière gelijkgesteld aan *7 nm*.



Figuur 13: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $L = 7\ nm$ in grafeen, in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de invalshoek ϕ.



Figuur 14: De transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalbarrière met hoogte V_0 en breedte $L = 7\ nm$ in grafeen, in functie van $\frac{E}{V_0}$ en de transversale component van de golfvector k_y.

Zoals verwacht, is de plot gelijkaardig aan het potentiaalstap-geval. Ditmaal verschijnen echter resonanties in de gebieden waar men bij de potentiaalstap ook transmissie kon waarnemen. Deze resonanties worden mathematisch beschreven door volgende voorwaarde (met n een geheel getal):

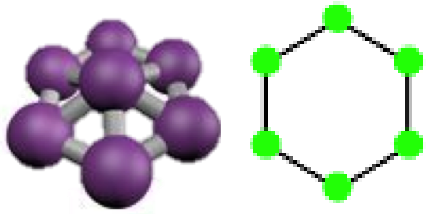
$$\begin{aligned} L &= n\frac{\lambda}{2} = n\frac{1}{2}\frac{2\pi}{k_2} = n\frac{\pi}{k_2}, \\ &\Leftrightarrow k_2 L = n\pi, \\ &\Leftrightarrow \sin(k_2 L) = 0. \end{aligned} \tag{49}$$

De breedte van de barrière dient met andere woorden gelijk te zijn aan een geheel veelvoud van de helft van de golflengte van de inkomende golf. Inderdaad, indien deze voorwaarde gesubstitueerd wordt in vergelijking (48), resulteert dit in $T = 1$.

4 Borofeen

4.1 Theoretische achtergrond borofeen

In het vervolg van dit werk wordt van naderbij gekeken naar enkele eigenschappen van een dubbellaag borofeen. Borofeen is de naam die wordt gegeven aan tweedimensionale lagen boor-atomen. Het element boor bevindt zich in het periodiek systeem aan de linkerzijde van koolstof, wat maakt dat boor over drie valentie-elektronen beschikt, in plaats van over vier. Dit heeft tot gevolg dat de bekende honingraatstructuur die men terugvindt in grafeen, niet zal verschijnen bij borofeen. Figuur 15 toont het onderscheid tussen de eenheidscellen van beide tweedimensionale materialen.

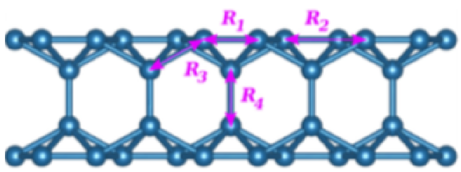


(a) (b)

Figuur 15: Schematische voorstelling van een eenheidscel van borofeen[9] (figuur (a)) en een eenheidscel van grafeen[10] (figuur (b)).

Reeds in januari 2014 toonden berekeningen aan dat het in theorie mogelijk was een laag booratomen, ofte borofeen, te maken[9]. Later slaagde men er ook in deze productie daadwerkelijk tot stand te brengen door gebruik te maken van een vacuümkamer, waarin men een zilversubstraat bracht. Door een hoeveelheid boor eerst te laten verdampen en vervolgens te laten neerslaan op het substraat ontstaat als het ware een boorfilm[9].

De twee borofeenlagen in de dubbellaag zijn aan elkaar gebonden door een soort 'zuiltjes' die bestaan tussen het middelste atoom van een eenheidscel uit laag één en het middelste atoom van een eenheidscel uit de tweede laag. Dit wordt afgebeeld in figuur 16.



Figuur 16: Twee lagen borofeen, verbonden door zuiltjes[2]

.

De dubbellaag borofeen met hexagonale structuur behoort tot de categorie van semimetalen. Het is bovendien een Dirac materiaal dat beschikt over een 'node lijn' [2], zijnde een lijn waar conductie- en valentiebanden elkaar raken. In wat volgt zal het gedrag van een vrij deeltje onderzocht worden, vertrekkende van de Hamiltoniaan die reeds door enkele onderzoekers werd opgesteld en gepubliceerd in de paper *'Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding modal and low-energy effective Hamiltonian'*[2]. De eigenwaarden van de Hamiltoniaan zullen berekend en geplot worden. De volgende stap is dan het onderzoeken van het gedrag van de golffunctie aan een potentiaalstap.

4.2 Vrij deeltje

De Hamiltoniaan die het gedrag van elektronen in borofeen beschrijft, wordt gegeven door vergelijking (50)[2]:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\Pi^{\dagger 2}}{2m_e} - \nu_e \Pi & M & 0 \\ \frac{-\Pi^2}{2m_e} - \nu_e \Pi^\dagger & \lambda & 0 & M \\ M & 0 & -\lambda & \frac{-\Pi^{\dagger 2}}{2m_h} + \nu_h \Pi \\ 0 & M & \frac{-\Pi^2}{2m_h} + \nu_h \Pi \dagger & -\lambda \end{bmatrix}. \tag{50}$$

Het afleiden van deze Hamiltoniaan valt buiten het bestek van deze thesis.
De parameter λ geeft de energieshift tussen het niveau van de elektronen en dat van de gaten weer. Verder geldt dat $\Pi = p_x + ip_y$. Andere parameters zijn m_e, ν_e en m_h, ν_h. Deze

stellen respectievelijk de massa en snelheid van de elektronen en de gaten voor.

Het is duidelijk dat deze Hamiltoniaan zowel elementen van de Dirac-Hamiltoniaan als van de Schrödinger-Hamiltoniaan bevat. Door bijvoorbeeld de inverse massa ($\frac{1}{m_{e,h}}$) naar nul te laten gaan, zorgt men ervoor dat enkel rekening gehouden wordt met het Diracgedeelte. Door echter de snelheidsparameter ($\nu_{e,h}$) gelijk te stellen aan nul, blijft een Hamiltoniaan over waarin enkel nog het Schrödingergedeelte een invloed uitoefent.

De hoofdletter M is de parameter die instaat voor de koppeling tussen het blok der elektronen en dat van de gaten in de Hamiltoniaanmatrix. Ter vereenvoudiging wordt deze in het vervolg van dit werk gelijk gekozen aan nul. Deze keuze maakt dat de vergelijkingen die het gedrag van elektronen beschrijven ontkoppeld zijn van de vergelijkingen die horen bij de gaten. Het is dus mogelijk deze los van elkaar te beschouwen. Het elektronenprobleem heeft dan een golffunctie die moet voldoen aan vergelijking (51):

$$\begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\hbar^2}{2m_e}(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial y})^2-\nu_e\hbar(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}) \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e}(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y})^2-\nu_e\hbar(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial y}) & \lambda \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix}=E\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix}. \quad (51)$$

Hieruit kan men de eigenwaarden voor het elektrongedrag halen:

$$E_c=\lambda-\frac{\hbar k}{2m_e}\sqrt{\hbar^2k^2+4\hbar k m_e\nu_e\cos 3\phi+4m_e^2\nu_e^2}. \quad (52)$$

Analoog bekomt men de eigenwaarden horend bij de eigenfuncties van de gaten:

$$E_v=-\lambda+\frac{\hbar k}{2m_h}\sqrt{\hbar^2k^2-4\hbar k m_h\nu_h\cos 3\phi+4m_h^2\nu_h^2}, \quad (53)$$

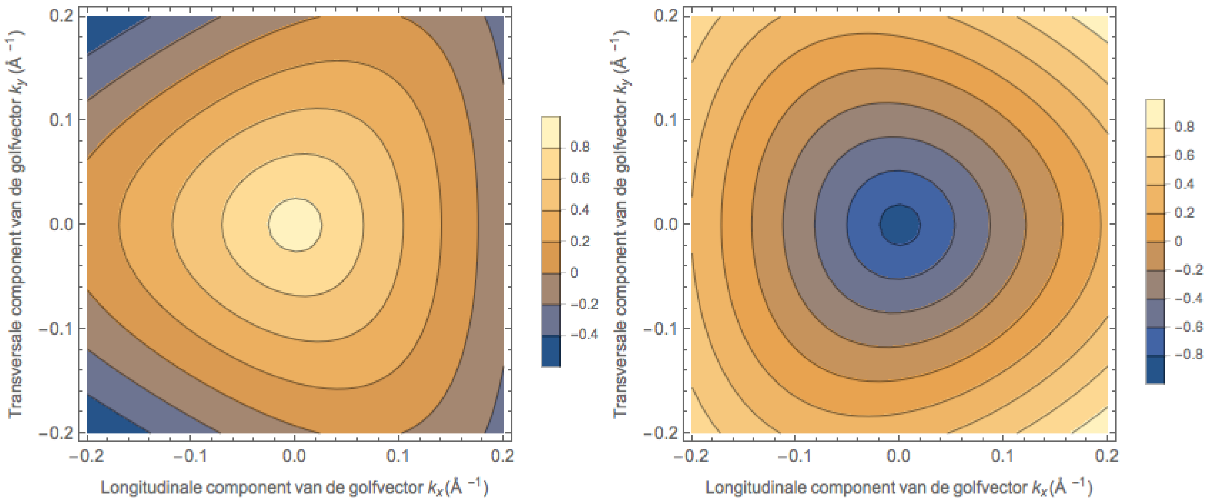
met

$$\begin{cases} k_x = k\cos\phi, \\ k_y = k\sin\phi. \end{cases}$$

4.3 Eigenwaarden van de Hamiltoniaan

De energiewaarden E_c en E_v worden geplot, gebruik makend van volgende parameterwaarden[2]:

$$\begin{aligned} m_e &= 0.174\hbar^2 \mathring{A}^{-2}eV^{-1}, \\ m_h &= 0.255\hbar^2 \mathring{A}^{-2}eV^{-1}, \\ \hbar\nu_e &= 4.744eV\mathring{A}, \\ \hbar\nu_h &= 6.184eV\mathring{A}, \\ \lambda &= 0.992eV. \end{aligned} \quad (54)$$



(a) (b)

Figuur 17: Contourplot van de eigenwaarden E_c (figuur (a)) en E_v (figuur (b)) in functie van de longitudinale en transversale componenten van de golfvector, respectievelijk k_x en k_y.

Uit figuur 17 blijkt duidelijk het trigonale karakter van de energiewaarden. De oriëntaties voor gaten en elektronen verschillen van elkaar; ze zijn ten opzichte van elkaar geroteerd over 180°. De nulpunten van de energiewaarden worden vervolgens berekend, voor het geval $\lambda = 0$. Voor E_c worden volgende nulpunten gevonden:

$$k_{\pm} = \frac{-2m_e v_e \cos(3\phi) \pm 2m_e v_e \sqrt{\cos^2(3\phi) - 1}}{\hbar}. \tag{55}$$

Dit resultaat is enkel reëel als de wortel gelijk is aan nul, waaruit dan de waarde voor de golfvector volgt die hoort bij het nulpunt van de energie:

$$\begin{aligned} \phi &= n\pi, \\ k_{\pm} &= \frac{\pm 2m_e v_e}{\hbar}. \end{aligned} \tag{56}$$

Een andere waarde van ϕ waarbij de energie zich tot nul zal reduceren wordt gegeven door:

$$\phi_{\pm} = \pm\frac{1}{3}Arccos(\frac{-4m_e^2 v_e^2 - \hbar^2 k^2}{4m_e v_e \hbar k}). \tag{57}$$

Analoog geldt voor E_v dat de energie nul is voor:

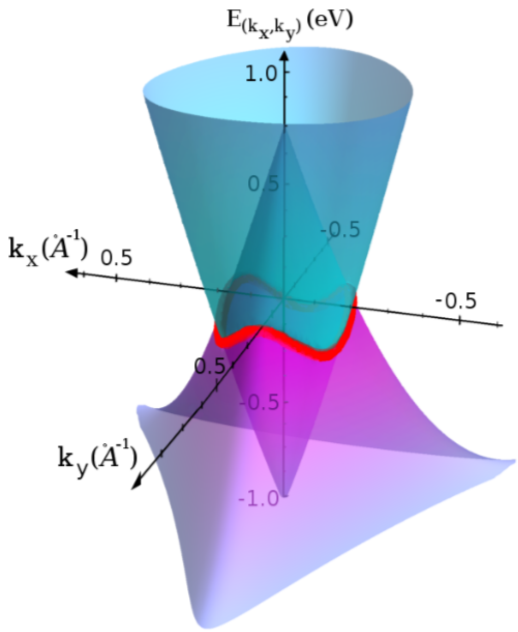
$$k_{\pm} = \frac{\pm 2m_h v_h}{\hbar}. \tag{58}$$

Een ander nulpunt wordt gegeven door vergelijking (59):

$$\phi_{\pm} = \pm\frac{1}{3}Arccos(\frac{4m_h^2 v_h^2 + \hbar^2 k^2}{4m_h v_h \hbar k}). \tag{59}$$

Opdat de nulpunten uit vergelijkingen (57) en (59) zouden bestaan, mogen de absolute waarden van de argumenten van de boogcosinussen niet groter zijn dan één.

Teneinde een duidelijker beeld te verschaffen van het trigonale karakter, wordt een plot[2] getoond van de eigenwaarden in functie van de longitudinale en transversale componenten van de golfvector. Deze plot (figuur 18) toont dat er als het ware twee kegels ('cones') zijn, waarvan de top van de eerste opwaarts en die van de tweede neerwaarts gericht is. De twee kegels zullen elkaar snijden, zoals geïllustreerd wordt in figuur 18[2]. Het voorschrift van de snijlijn ('node lijn', dit is de rode lijn in figuur 18) wordt berekend in sectie 4.5.

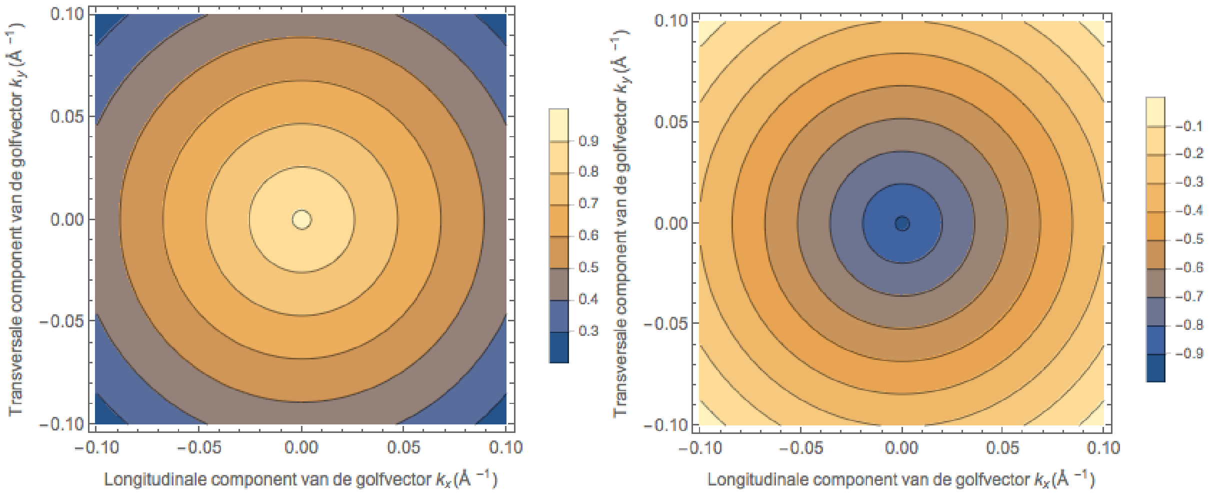


Figuur 18: Voorstelling van de valentie- en conductiebanden in borofeen[2], waarbij ook de node lijn afgebeeld wordt.

4.4 Effect van de verschillende parameters op het gedrag van de energie

Omwille van het verschijnen van trigonale symmetrie in de contourplots van de eigenwaarden van de borofeen-Hamiltoniaan, is het zinvol na te gaan op welke wijze de energiewaarden invloed ondervinden van het modificeren van enkele parameters. Zowel de inverse massa als de snelheid van de deeltjes zal gevarieerd worden.

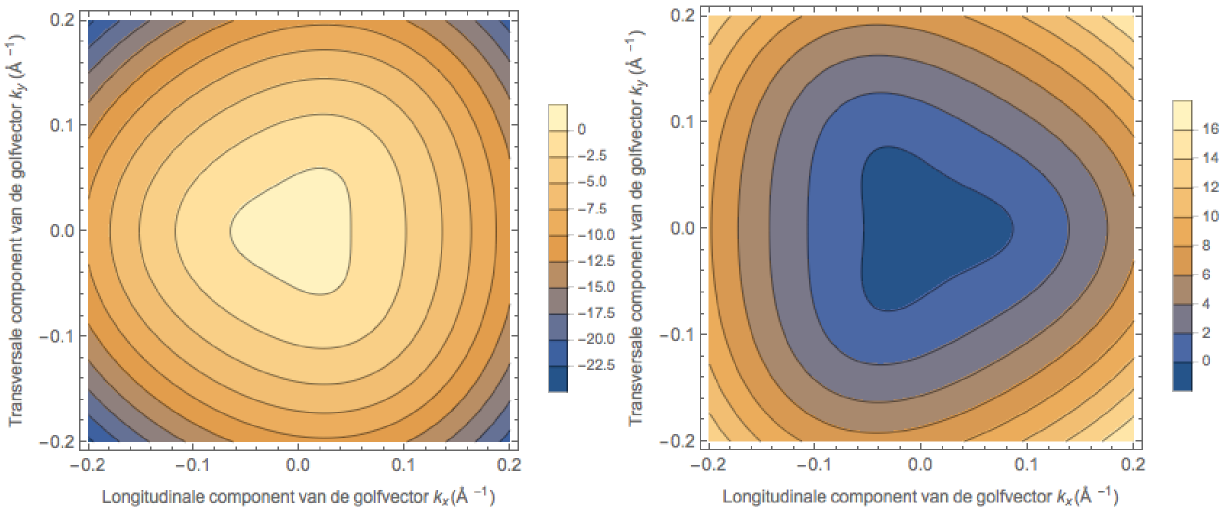
Wanneer men de inverse massa-parameter reduceert, wat correspondeert met het uitschakelen van het aandeel van het stuk in de Hamiltoniaan dat aanleiding geeft tot Schrödingergedrag, zal het trigonale karakter uit de plots verdwijnen. Dit resultaat wordt weergegeven voor zowel de eigenwaarden die overeenkomen met de elektronen als voor de eigenwaarden die horen bij de gaten in figuur 19.



(a) (b)

Figuur 19: Contourplot van de eigenwaarden E_c (figuur (a)) en E_v (figuur (b)) in functie van de longitudinale component (k_x) en transversale component (k_y) van de golfvector, waarbij de inverse massa-parameter teruggebracht is tot nul.

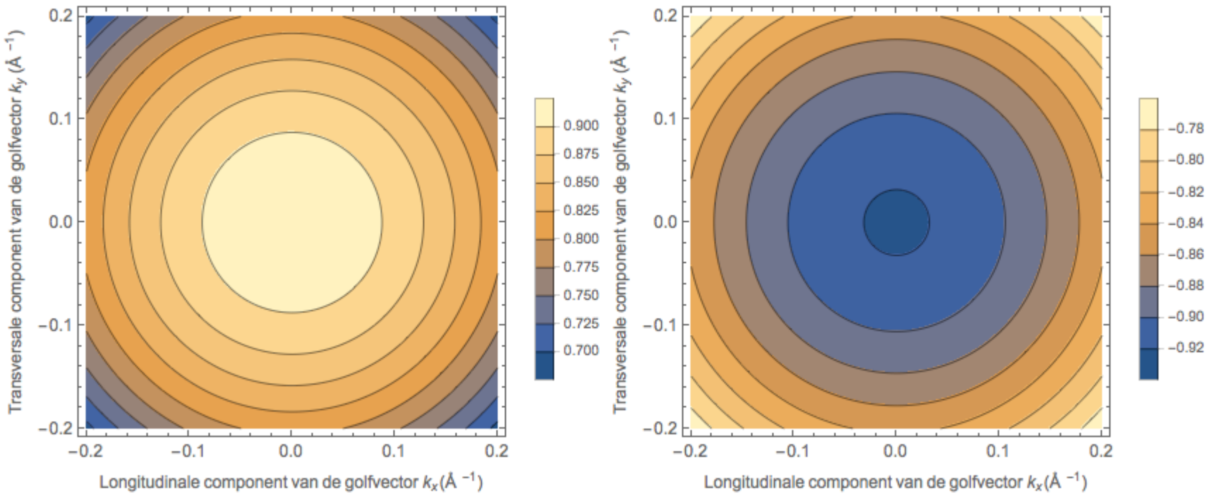
Indien men echter de inverse massa-parameter laat toenemen in waarde, zal het opvallende gedrag van de eigenwaarden zich duidelijker manifesteren, zoals duidelijk te zien in figuur 20, waar de inverse massa-parameter een factor 100 vergroot wordt. Bij verdere toename van deze parameter zal opnieuw het trigonale karakter niet meer onderscheiden kunnen worden in de plots.



(a) (b)

Figuur 20: Contourplot van de eigenwaarden E_c (figuur (a)) en E_v (figuur (b)) in functie van de longitudinale component (k_x) en transversale component (k_y) van de golfvector, waarbij de inverse massa-parameter verhoogd is met een factor 100.

Daarnaast kan ook de snelheidsparameter gemodificeerd worden. In dit geval bepaalt men de bijdrage van het deel in de Hamiltoniaan dat sterk gelijkt op de Dirac-Hamiltoniaan. Wanneer de bijdrage van dit deel volledig wordt uitgeschakeld, dat wil zeggen de snelheidsparameter wordt gelijkgesteld aan nul, zal wederom het trigonaal karakter verdwijnen.



(a) (b)

Figuur 21: Contourplot van de eigenwaarden E_c (figuur (a)) en E_v (figuur (b)) in functie van de longitudinale component (k_x) en transversale component (k_y) van de golfvector, waarbij de snelheidsparameter gelijkgesteld wordt aan nul.

Ook verhoging van de snelheidsparameter leidt tot een sferische in plaats van trigonale symmetrie.

4.5 Node lijn

Uit de resultaten van de vorige sectie blijkt dat de energiewaarden van elektronen en gaten in functie van de golfvectoren als het ware trigonale kegels vormen. Deze kegels zijn geroteerd ten opzichte van elkaar en bovendien is de top van de ene neerwaarts en die van de andere opwaarts gericht. Men kan nu trachten te achterhalen waar deze kegels elkaar zullen snijden. De lijn die de overlap tussen de twee trigonale kegels weergeeft, wordt de 'node lijn' genoemd. Aangezien de 'node lijn' de snijlijn is van de twee kegels, kan haar voorschrift achterhaald worden door de waarden van de energie E_c en E_v aan elkaar gelijk te stellen. In de volgende berekening wordt aangenomen dat zowel ν_e als ν_h klein zijn, waardoor termen die kwadratisch zijn in ν verwaarloosd kunnen worden:

$$\begin{aligned}
E_c &= E_v, \\
\Leftrightarrow \lambda - \frac{\hbar k}{2m_e}\sqrt{\hbar^2k^2 + 4\hbar k m_e \nu_e \cos 3\phi + 4m_e^2\nu_e^2} &= -\lambda + \frac{\hbar k}{2m_h}\sqrt{\hbar^2k^2 - 4\hbar k m_h \nu_h \cos 3\phi + 4m_h^2\nu_h^2}, \\
\Leftrightarrow \lambda - \frac{\hbar k}{2m_e}\sqrt{\hbar^2k^2(1 + \frac{4m_e\nu_e\cos 3\phi}{\hbar k} + \frac{4m_e^2\nu_e^2}{\hbar^2k^2})} &= -\lambda + \frac{\hbar k}{2m_h}\sqrt{\hbar^2k^2(1 - \frac{4m_h\nu_h\cos 3\phi}{\hbar k} + \frac{4m_h^2\nu_h^2}{\hbar^2k^2})}, \\
\Rightarrow \lambda - \frac{(\hbar k)^2}{2m_e}(1 + \frac{1}{2}\frac{4m_e\nu_e\cos 3\phi}{\hbar k}) &\approx -\lambda + \frac{(\hbar k)^2}{2m_h}(1 + \frac{1}{2}\frac{-4m_h\nu_h\cos 3\phi}{\hbar k}). \qquad (60)
\end{aligned}$$

De node lijn wordt bijgevolg beschreven door vergelijking (61):

$$\Rightarrow \hbar k = \frac{(\nu_h - \nu_e)\cos(3\phi) \pm \sqrt{(\nu_e - \nu_h)^2\cos^2(3\phi) + 4\lambda(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h})}}{(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h})}. \qquad (61)$$

4.6 Eendimensionale potentiaalstap met translatie-symmetrie in de y-richting

Het probleem dat nu aangepakt dient te worden, is wederom dat van de eendimensionale potentiaalstap. De golffunctie wordt berekend, waarna de stroomdichtheid bepaald wordt. Aan de hand daarvan kan vervolgens de transmissiewaarschijnlijkheid bepaald en geplot worden. Ook nu wordt de potentiaal gegeven door:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & x > 0. \end{cases} \tag{62}$$

Dit maakt dat de golffuncties moeten voldoen aan:

$$\begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\Pi^{\dagger 2}}{2m_e} - \nu_e \Pi \\ \frac{-\Pi^2}{2m_e} - \nu_e \Pi^\dagger & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} + V(x,y) \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}. \tag{63}$$

Er wordt gebruik gemaakt van de translatie-invariantie in de y-richting, wat maakt dat de golfvector k_y een behouden grootheid is. De golffunctie zal dus het product zijn van een x-afhankelijk deel en een y-afhankelijk deel dat correspondeert met de golffunctie van een vrij deeltje in de y-richting. Ter vereenvoudiging van het probleem, wordt k_y in wat volgt nul verondersteld.

4.6.1 Het gedrag van k_x in functie van de energiewaarden

Indien k_y gelijkgesteld wordt aan nul (er wordt met andere woorden enkel gekeken naar loddrechte inval op de stap), wordt de Hamiltoniaan gegeven door vergelijking (64):

$$H = \begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\hbar^2}{2m_e} k_x^2 - \nu_e \hbar k_x \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e} k_x^2 - \nu_e \hbar k_x & \lambda \end{bmatrix}. \tag{64}$$

De energiewaarden horend bij deze Hamiltoniaan zijn dan:

$$E_1 = \frac{-\hbar^2 k_x^2 - 2\hbar k_x m_e \nu_e + 2m_e \lambda}{2m_e}, \tag{65}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k_x^2 + 2\hbar k_x m_e \nu_e + 2m_e \lambda}{2m_e}. \tag{66}$$

Het is nu mogelijk zowel vergelijking (65) als (66) te inverteren, zodanig dat er een uitdrukking komt voor k_x in functie van de energie. Voor E_1 leidt dit tot de volgende resultaten:

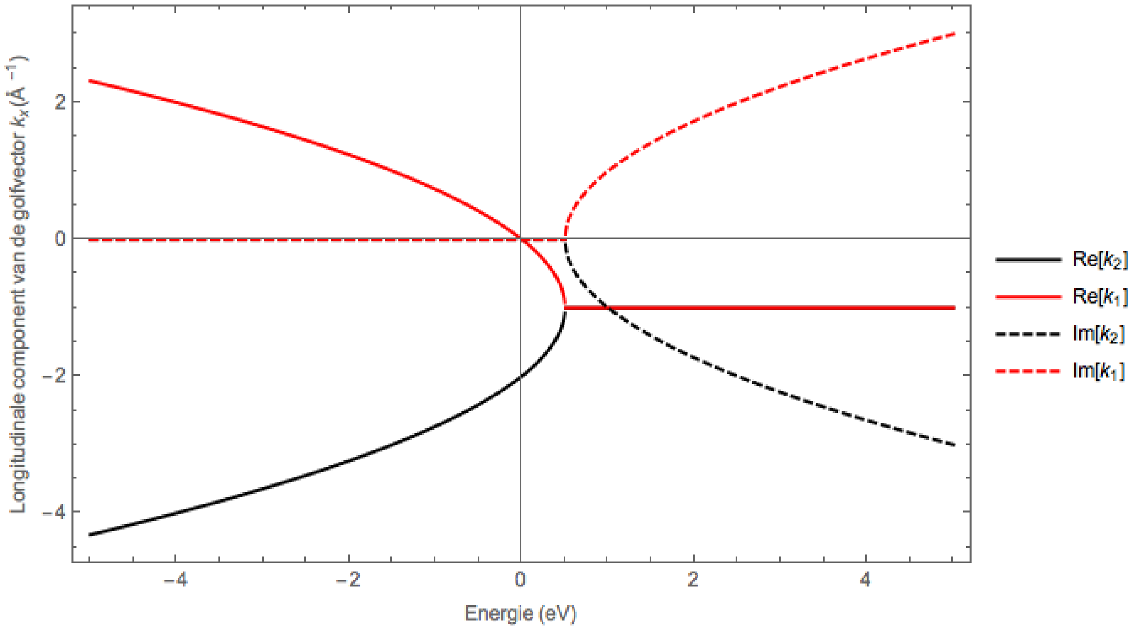
$$\begin{aligned} k_x &= [-m_e \nu_e + \sqrt{me}\sqrt{(-2E + m_e \nu_e^2 + 2\lambda)}]\frac{1}{\hbar} = k_1, \\ &\text{of} \\ k_x &= [-m_e \nu_e - \sqrt{me}\sqrt{(-2E + m_e \nu_e^2 + 2\lambda)}]\frac{1}{\hbar} = k_2. \end{aligned} \tag{67}$$

Analoog komt er voor de tweede eigenwaarde:

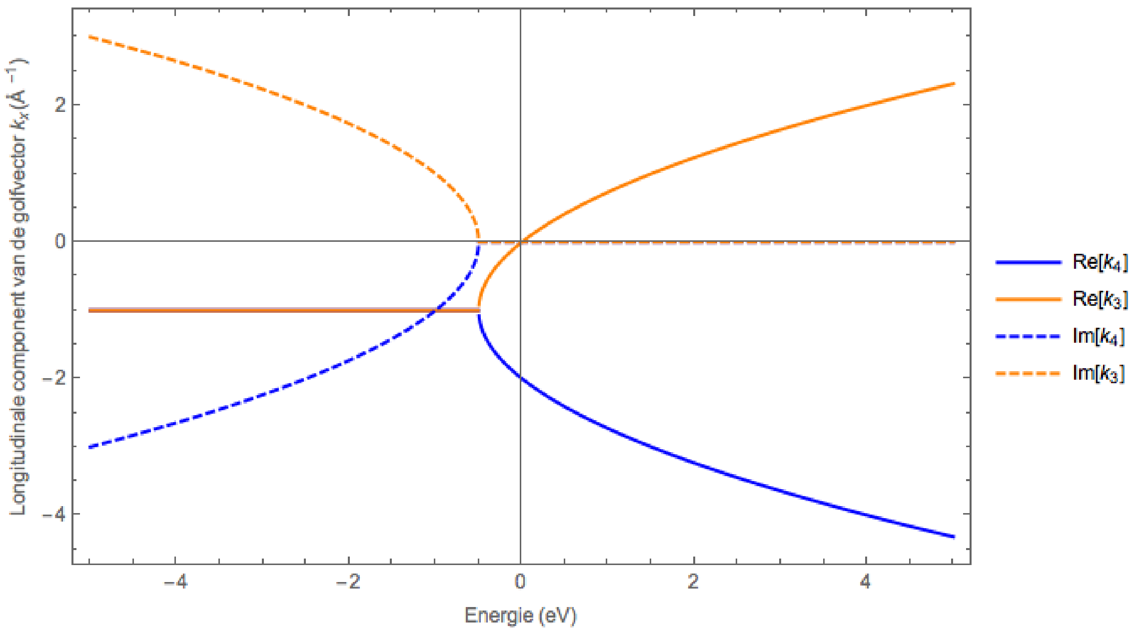
$$\begin{aligned} k_x &= [-m_e \nu_e + \sqrt{me}\sqrt{2E + m_e \nu_e^2 - 2\lambda}]\frac{1}{\hbar} = k_3, \\ &\text{of} \\ k_x &= [-m_e \nu_e - \sqrt{me}\sqrt{2E + m_e \nu_e^2 - 2\lambda}]\frac{1}{\hbar} = k_4. \end{aligned} \tag{68}$$

Een expliciete weergave van de reële en imaginaire delen van deze k_x-waarden in functie van de energie wordt getoond. Hierbij wordt de parameter m_e gelijkgesteld aan

$1\hbar^2 \mathring{A}^{-2} eV^{-1}$ (dit komt overeen met $m_e \approx 7.6\ m_{e,rust}$, met $m_{e,rust}$ de rustmassa van een vrij elektron) en de parameter $\nu_e = 1\hbar^{-1} \mathring{A} eV$ (dit komt overeen met $\nu_e \approx 15.10^4\ m.s^{-1}$).



Figuur 22: De longitudinale component van de golfvector, k_x in functie van de energie, voor de eerste eigenwaarde E_1, met $m_e = 1\hbar^2 \mathring{A}^{-2} eV^{-1}$ en $\nu_e = 1\hbar^{-1} \mathring{A} eV$.



Figuur 23: De longitudinale component van de golfvector, k_x in functie van de energie, voor de tweede eigenwaarde E_2, met $m_e = 1\hbar^2 \mathring{A}^{-2} eV^{-1}$ en $\nu_e = 1\hbar^{-1} \mathring{A} eV$.

Uit bovenstaande figuren blijkt dat, vanaf een voldoende grote (positieve) waarde van de energie steevast vier oplossingen voor k_x gevonden kunnen worden bij een bepaalde energiewaarde.

4.6.2 Golffunctie

De k-waarden in gebied I ($x < 0$, $V = 0$) worden hieronder opgelijst:

$$\begin{array}{rcl} k_1 & = & k_1^R + ik_1^I, \\ k_2 & = & k_2^R - ik_2^I, \\ k_3 & = & k_3^R, \\ k_4 & = & -k_4^R. \end{array} \tag{69}$$

Hierbij worden alle $k_j^{R,I}$ positief verondersteld.

Het imaginaire deel van k_1 geeft aanleiding tot een exponentieel dalende functie. Omwille van de randvoorwaarden op $-\infty$ dient deze niet meegenomen te worden in de oplossing. De vorm van de golffunctie in gebied I kan dan als volgt voorgesteld worden:

$$\Psi_I = b_1 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} e^{ik_2x} + c_1 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} e^{ik_3x} + d_1 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} e^{ik_4x}. \tag{70}$$

Coëfficiënt c_1 correspondeert met de invallende golf ($c_1 = 1$) en coëfficiënt d_1 met de gereflecteerde golf ($d_1 = r$).

Op dezelfde wijze wordt te werk gegaan in gebied II ($x > 0, V \neq 0$). Hier dient E vervangen te worden door *E-V*. Men volgt dus hetzelfde principe, maar er moet rekening gehouden worden met andere randvoorwaarden (deze keer op $+\infty$):

$$\begin{array}{rcl} k'_1 & = & k_1'^R + ik_1'^I, \\ k'_2 & = & k_2'^R - ik_2'^I, \\ k'_3 & = & k_3'^R, \\ k'_4 & = & -k_4'^R. \end{array} \tag{71}$$

Hierbij worden wederom alle $k_j'^{R,I}$ positief verondersteld.

Aangezien het imaginaire deel van k'_2 nu aanleiding geeft tot een exponentieel stijgende functie, wordt de coëfficiënt die correspondeert met dit deel van de golffunctie aan nul gelijkgesteld. Ook de coëfficiënt bij k'_4 wordt nul gekozen, omdat deze een naar links lopende golf voorstelt. Ditmaal wordt de vorm van de golffunctie wordt gegeven door:

$$\Psi_{II} = a_2 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} e^{ik'_1x} + c_2 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} e^{ik'_3x}. \tag{72}$$

Voor $x < 0$ en bijgevolg $V = 0$, geeft vergelijking (73) de golffunctie weer (deze bevat dus zowel de invallende als gereflecteerde golven). In termen van reflectiecoëfficiënten:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}_I &= b_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{E-\lambda}\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_2^2 - \nu_e\hbar k_2\right] \end{bmatrix} e^{ik_2x} + 1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{E-\lambda}\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3^2 - \nu_e\hbar k_3\right] \end{bmatrix} e^{ik_3x} \\ &+ r \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{E-\lambda}\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e}(k_4)^2 - \nu_e\hbar k_4\right] \end{bmatrix} e^{ik_4x}. \end{aligned} \tag{73}$$

De doorgelaten golf wordt beschreven door vergelijking (74). Hiervoor is de x-coördinaat positief en is de potentiaal verschillend van nul. k_1' is de golfvector die hoort bij de doorgelaten, exponentieel dalende golf:

$$\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix}_{II} = a_2 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_1'^2 - \nu_e\hbar k_1'] \end{bmatrix} e^{ik_1'x} + t \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3'^2 - \nu_e\hbar k_3'] \end{bmatrix} e^{ik_3'x}. \tag{74}$$

De reflectie- en transmissiecoëfficiënten kunnen nader bepaald worden door gebruik te maken van de continuïteit van de golffunctie in het punt $x = 0$. Extra vergelijkingen worden bekomen via de continuïteitsvoorwaarde van de eerste afgeleide van de golffunctie in het punt $x = 0$. Op deze manier zijn er vier vergelijkingen die het mogelijk maken de vier onbekenden te bepalen.

$$\begin{aligned}
0 &= b_1 + 1 + r - a_2 - t,\\
0 &= \frac{b_1}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_2^2 - \nu_e\hbar k_2] + \frac{1}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3^2 - \nu_e\hbar k_3] + \frac{r}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_4^2 - \nu_e\hbar k_4] -\\
&\quad \frac{a_2}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_1'^2 - \nu_e\hbar k_1'] - \frac{t}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3'^2 - \nu_e\hbar k_3'],\\
0 &= k_2 b_1 + k_3 + k_4 r - k_1' a_2 - k_3' t,\\
0 &= \frac{k_2 b_1}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_2^2 - \nu_e\hbar k_2] + \frac{k_3}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3^2 - \nu_e\hbar k_3] + \frac{k_4 r}{E-\lambda}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_4^2 - \nu_e\hbar k_4] -\\
&\quad \frac{k_1' a_2}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_1'^2 - \nu_e\hbar k_1'] - \frac{k_3' t}{E-\lambda-V}[\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3'^2 - \nu_e\hbar k_3'].
\end{aligned} \tag{75}$$

Aan de hand daarvan kan in een volgende sectie de transmissiewaarschijnlijkheid geplot worden.

4.6.3 Stroomdichtheid

Teneinde de transmissiewaarschijnlijkheid te kunnen berekenen, is het vereist een uitdrukking voor de stroomdichtheid af te leiden. Hiertoe wordt nog steeds k_y nul verondersteld, alsook λ. Dit vereenvoudigt de Hamiltoniaanse matrix, zodat nu geldt:

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\delta\Psi}{\delta t} &= (\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_x^2 - \nu_e\hbar k_x)\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\Psi = H\Psi,\\
&= (\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_x^2 - \nu_e\hbar k_x)\sigma_x\Psi.
\end{aligned} \tag{76}$$

Hierbij wordt de σ_x Pauli matrix ingevoerd.

Vermenigvuldiging van vergelijking (76) met de hermitisch toegevoegde golffunctie, $\Psi^\dagger$, levert:

$$\begin{aligned}
i\hbar\Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \Psi^\dagger\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_x^2\sigma_x\Psi - \Psi^\dagger\nu_e\hbar k_x\sigma_x\Psi,\\
&= \frac{\hbar^2}{2m_e}\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_x^2\Psi) + i\hbar\nu_e\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_x\Psi).
\end{aligned} \tag{77}$$

De complex toegevoegde van uitdrukking (77) is dan:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi = \frac{\hbar^2}{2m_e}(\partial_x^2\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi - i\hbar\nu_e(\partial_x\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi. \tag{78}$$

Combineren van vergelijkingen (77) en (78) leidt dan tot een uitdrukking voor de stroomdichtheid, waarbij gebruik gemaakt wordt van de continuïteitsvergelijking.

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \partial[\frac{\hbar^2}{2m_e}(\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_x\Psi) - (\partial_x\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi) + i\hbar\nu_e(\Psi^\dagger\sigma_x\Psi)], \\
&= -i\hbar\partial_x[\frac{i\hbar}{2m_e}(\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_x\Psi) - (\partial_x\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi) - \nu_e(\Psi^\dagger\sigma_x\Psi)], \\
\Rightarrow j_x &= \frac{i\hbar}{2m_e}(\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_x\Psi) - (\partial_x\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi) - \nu_e(\Psi^\dagger\sigma_x\Psi). \qquad (79)
\end{aligned}
$$

Opmerking: Ter controle kan het limietgedrag van de stroomdichtheid onderzocht worden. In de limiet $\nu_e \rightarrow 0$ herleidt de dichtheid zich tot die van het Schrödinger-geval, terwijl voor de limiet $m_e^{-1} \rightarrow 0$ de Dirac-uitdrukking verschijnt.

4.6.4 Transmissiewaarschijnlijkheid

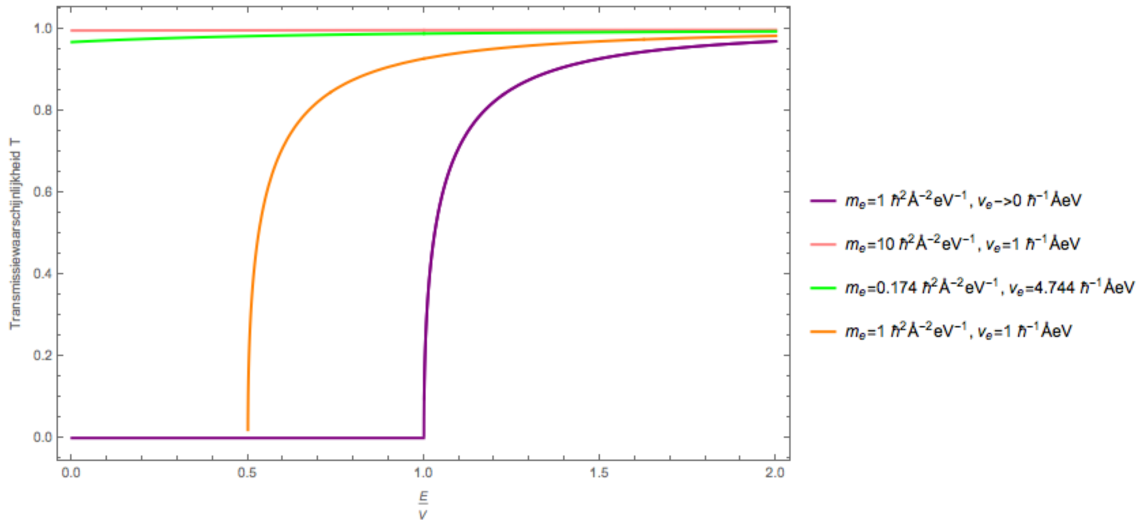
De transmissiewaarschijnlijkheid wordt gedefinieerd als de verhouding (80):

$$T = \frac{j_t}{j_i}. \qquad (80)$$

Voor de exponentieel dalende component van de golffunctie geldt dat op $+\infty$ de stroomdichtheid naar nul gaat. Het is bijgevolg niet zinvol om hiervoor de transmissiewaarschijnlijkheid uit te rekenen. Dit komt neer op het feit dat voor de doorgelaten golf het gedeelte dat bij $e^{ik'_1}$ staat, niet meegenomen dient te worden in verdere berekeningen. Dit maakt dat de transmissiewaarschijnlijkheid gegeven wordt door uitdrukking (81):

$$T = \frac{E}{E-V}\frac{|t|^2(\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3'^2 - \nu_e\hbar k_3')(\frac{\hbar k_3'}{m_e} + \nu_e)}{(\frac{-\hbar^2}{2m_e}k_3^2 - \nu_e\hbar k_3)(\frac{\hbar k_3}{m_e} + \nu_e)}. \qquad (81)$$

Voor verschillende waarden van de parameters m_e en ν_e wordt een plot gegenereerd van de transmissiewaarschijnlijkheid in functie van de energie. Wat in eerste instantie verwacht wordt, is dat indien men het Schrödinger-deel niet meeneemt in de uiteindelijke transmissie en men bijgevolg enkel kijkt naar het transmissiegedrag waartoe het Dirac-gedeelte aanleiding geeft, er volledige transmissie zal zijn (er wordt gekeken naar loodrechte inval op de potentiaalstap), onafhankelijk van de waarde van de energie. Omgekeerd, als enkel het Schrödinger-gedeelte wordt bekeken, is de verwachting dat vanaf voldoende hoge energiewaarden transmissie zal optreden.



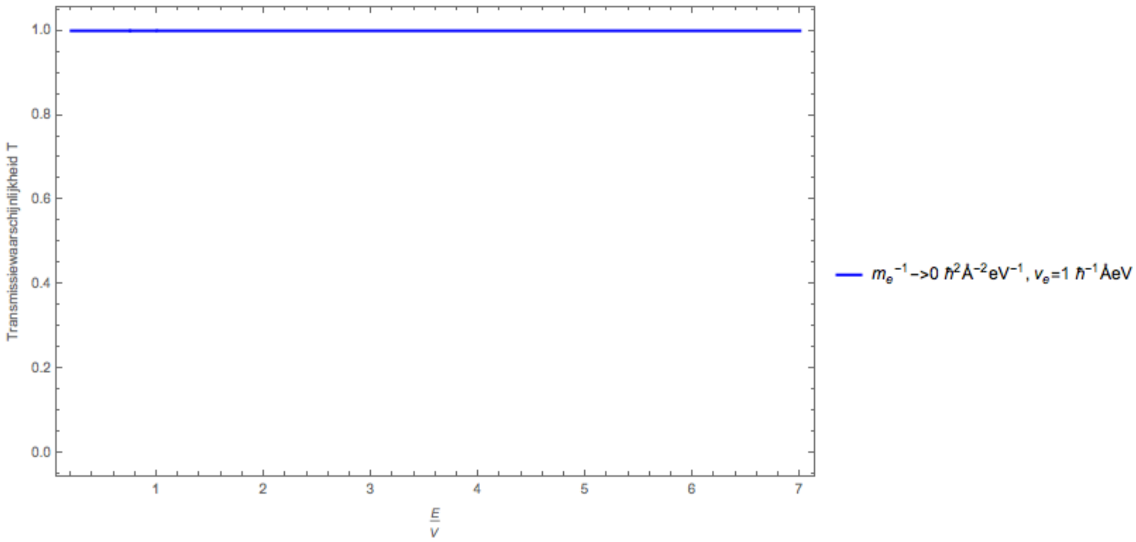
Figuur 24: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de y-richting voor borofeen, in functie van de energie voor verschillende waarden van de parameters m_e en ν_e.

Bij het plotten van de oranje curve in bovenstaande figuur wordt een even groot gewicht gegeven aan beide parameters. Deze curve vertoont duidelijk een stijgend gedrag: hoe hoger de energie, hoe groter de transmissiewaarschijnlijkheid wordt. Voor $\frac{E}{V} < 0.5$ is de transmissiewaarschijnlijkheid gelijk aan nul.

De paarse curve toont wat er gebeurt indien men de bijdrage van het Dirac-deel uitsluit. Hieruit blijkt dat slechts voor voldoende hoge waarden van de energie ($\frac{E}{V} \geq 1$) de kans op transmissie zal verschillen van nul. Dit resultaat komt overeen met wat men verwacht van een zuiver Schrödinger-geval. Naarmate het Schrödinger-deel een grotere rol speelt (i.e. naarmate de inverse massa-parameter toeneemt), schuift het punt vanaf waar de transmissie-curve begint te stijgen op naar hogere energiewaarden (tot $\frac{E}{v} = 1$ voor het zuiver Schrödinger-geval).

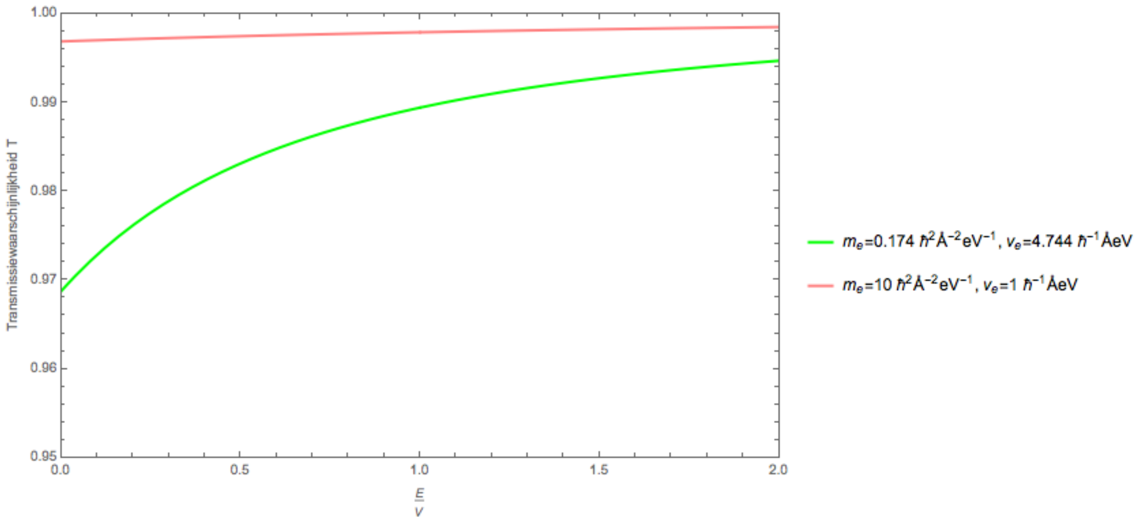
De groene plot in figuur 24 maakt gebruik van de waarden van de parameters zoals ze vermeld zijn in *'Dirac nodal line in bilayerborophene: Tight-binding modal and low-energy effective Hamiltonian'*[2]; $m_e = 0.174\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$ en $\nu_e = 4.744\hbar^{-1} \AA eV$. Na een kleine stijging bij lage energiewaarden bereikt deze curve de waarde $T = 1$.

De invloed van het verlagen van de inverse massa-parameter (i.e. laten afnemen van het aandeel van het Schrödinger-stuk) wordt getoond door de roze curve. Evenals bij de vorige curve is het gedrag van de transmissiewaarschijnlijkheid hier vrij constant. Dit wijst er reeds op dat de transmissie inderdaad neigt naar het zuivere Dirac-geval. Om dit resultaat te bevestigen, wordt in figuur 25 de transmissiewaarschijnlijkheid geplot voor het geval waarbij het Schrödinger-deel geen bijdrage meer levert.



Figuur 25: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting voor borofeen, in functie van de energie, met $m_e^{-1} \to 0\hbar^2 Å^{-2} eV^{-1}$ en $\nu_e = 1\hbar^{-1} ÅeV$.

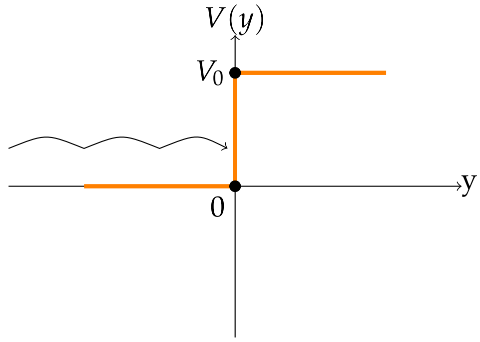
Ook deze plot illustreert dat aan bovengenoemde verwachtingen voldaan is. Teneinde een beter beeld te krijgen van het verloop van de roze en groene curve wordt tenslotte ingezoomd op deze figuren. Het resultaat is te zien in figuur 26. Beide curves vertonen een lichte stijging naarmate de waarde van de energie groter wordt.



Figuur 26: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de y-richting voor borofeen, in functie van de energie voor verschillende waarden van de parameters m_e en ν_e.

4.7 Eendimensionale potentiaalstap met translatie-symmetrie in de x-richting

Het is nu ook interessant een gelijkaardig probleem op te lossen, waarbij de translatiesymmetrie in de x-richting geldt in plaats van in de y-richting. De probleemsituatie wordt nu geschetst in figuur 27. Er wordt in deze sectie volledig analoog te werk gegaan als in sectie 4.6. Voor de volledigheid wordt toch de uitwerking van dit probleem gegeven.



Figuur 27: Een eendimensionale potentiaalstap met hoogte V_0.

In dit geval moeten de golffuncties voldoen aan:

$$\begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\Pi^{\dagger 2}}{2m_e} - \nu_e \Pi \\ \frac{-\Pi^2}{2m_e} - \nu_e \Pi^\dagger & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} + V(x,y) \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}, \tag{82}$$

waarbij de potentiaal gegeven wordt door:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & y < 0, \\ V_0 & y > 0. \end{cases} \tag{83}$$

.

4.7.1 Het gedrag van k_y in functie van de energiewaarden

Ook ditmaal wordt ervoor geopteerd loodrechte inval op de stap te beschouwen, wat betekent dat k_x gelijkgesteld wordt aan nul. Dit resulteert in volgende Hamiltoniaan (vergelijking (84)), met bijhorende eigenwaarden (vergelijkingen (85) en (86)):

$$H = \begin{bmatrix} \lambda & \frac{-\hbar^2}{2m_e}(-ik_y)^2 - \nu_e \hbar (ik_y) \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e}(ik_y)^2 - \nu_e \hbar(-ik_y) & \lambda \end{bmatrix}, \tag{84}$$

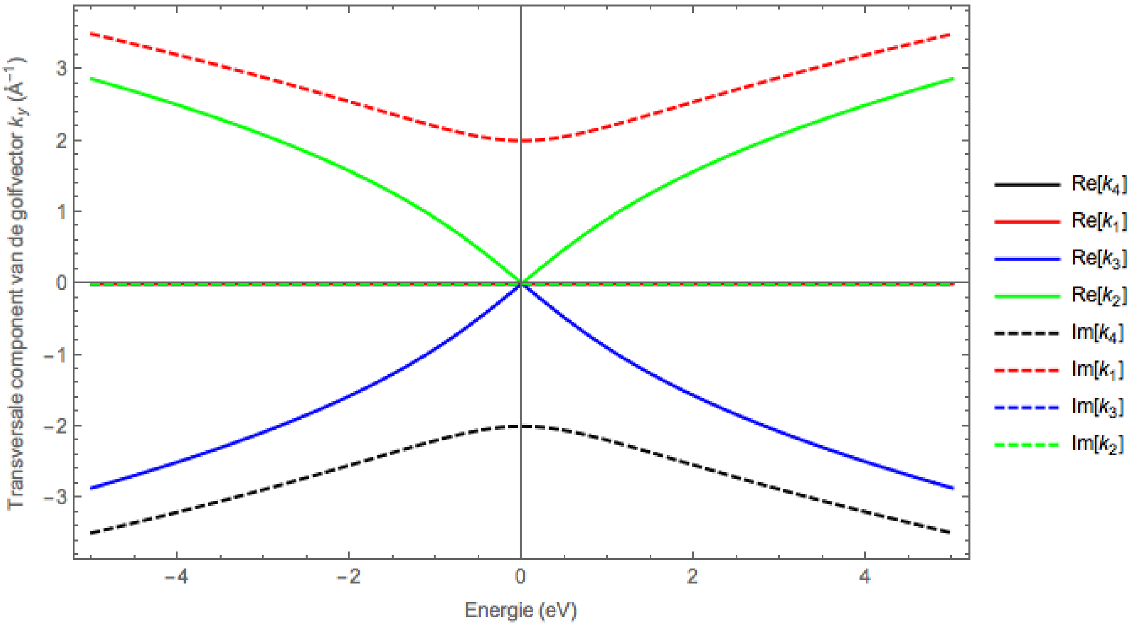
$$E_1 = \frac{-\sqrt{\hbar^4 k_y^4 + 4\hbar^2 k_y^2 m_e^2 \nu_e^2} + 2m_e\lambda}{2m_e}, \tag{85}$$

$$E_2 = \frac{\sqrt{\hbar^4 k_y^4 + 4\hbar^2 k_y^2 m_e^2 \nu_e^2} + 2m_e\lambda}{2m_e}. \tag{86}$$

Hiervan vertrekkende, kan, zoals eerder, een uitdruking gevonden worden voor de k_y-waarden in functie van de energieën. Bij elke eigenwaarde kunnen vier k_y-waarden berekend worden:

$$\begin{cases} k_1 = \sqrt{2}\sqrt{-\frac{m_e^2\nu_e^2}{\hbar^2} - \frac{\sqrt{\hbar^4 m_e^2 (E^2 + me^2\nu_e^4 - 2E\lambda + \lambda^2)}}{\hbar^4}}, \\ k_2 = \sqrt{2}\sqrt{-\frac{m_e^2\nu_e^2}{\hbar^2} + \frac{\sqrt{\hbar^4 m_e^2 (E^2 + me^2\nu_e^4 - 2E\lambda + \lambda^2)}}{\hbar^4}}, \\ k_3 = -\sqrt{2}\sqrt{-\frac{m_e^2\nu_e^2}{\hbar^2} + \frac{\sqrt{\hbar^4 m_e^2 (E^2 + me^2\nu_e^4 - 2E\lambda + \lambda^2)}}{\hbar^4}}, \\ k_4 = -\sqrt{2}\sqrt{-\frac{m_e^2\nu_e^2}{\hbar^2} - \frac{\sqrt{\hbar^4 m_e^2 (E^2 + me^2\nu_e^4 - 2E\lambda + \lambda^2)}}{\hbar^4}}. \end{cases} \tag{87}$$

Het gedrag van enerzijds de reële en anderzijds de imaginaire delen van deze waarden wordt geplot als functie van de energie. Onderstaande plot werd gemaakt voor $m_e = 1\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$ en $v_e = 1\hbar^{-1} \AA eV$.



Figuur 28: De transversale component van de golfvector, k_y in functie van de energie, met $m_e = 1\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$ en $v_e = 1\hbar^{-1} \AA eV$.

4.7.2 Golffunctie

Voor een bepaalde energiewaarde bestaan er telkens vier bijhorende k_y-waarden. Analoog aan eerdere berekeningen (zie sectie 4.6), kan nu de golffunctie opgesteld worden. Voor de k_y-waarden in het gebied waar de potentiaal nul is ($y < 0, V = 0$), geldt namelijk:

$$\begin{aligned} k_1 &= k_1^R + ik_1^I, \\ k_2 &= k_2^R, \\ k_3 &= -k_3^R, \\ k_4 &= k_4^R - ik_4^I. \end{aligned} \tag{88}$$

Hierbij worden alle $k_j^{R,I}$ positief verondersteld.

Het imaginaire deel van k_1 geeft aanleiding tot een exponentieel dalende functie; randvoorwaarden op $-\infty$ zorgen ervoor dat deze niet meegenomen wordt in de oplossing. De golfvector k_2 correspondeert met de invallende golf, wat maakt dat genormaliseerd wordt op de bijhorende coëfficiënt, b_1. Verder hoort coëfficiënt c_1 bij de gereflecteerde golf ($c_1 = r$).

Een analoge analyse kan gemaakt worden in gebied II ($y > 0, V \neq 0$):

$$\begin{aligned} k_1' &= k_1'^R + ik_1'^I, \\ k_2' &= k_2'^R, \\ k_3' &= -k_3'^R, \\ k_4' &= k_4'^R - ik_4'^I. \end{aligned} \tag{89}$$

Hierbij worden wederom alle $k_j'^{R,I}$ positief verondersteld.

Dit alles leidt ertoe dat in gebied I de golffunctie gegeven wordt door:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}1\\ \frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_2^2+i\nu_e\hbar k_2]\end{bmatrix}e^{ik_2y}+r\begin{bmatrix}1\\ \frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_3^2+i\nu_e\hbar k_3]\end{bmatrix}e^{ik_3y}\\ &+ d_1\begin{bmatrix}1\\ \frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_4^2+i\nu_e\hbar k_4]\end{bmatrix}e^{ik_4y}. \end{aligned} \tag{90}$$

In het tweede gebied ($y > 0$, $V \neq 0$), geldt er dan:

$$\begin{bmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{bmatrix} = a_2\begin{bmatrix}1\\ \frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_1}^2+i\nu_e\hbar k'_1]\end{bmatrix}e^{ik'_1y}+t\begin{bmatrix}1\\ \frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_2}^2+i\nu_e\hbar k'_2]\end{bmatrix}e^{ik'_2y}. \tag{91}$$

Continuïteit van de golffunctie in $y = 0$ geeft aanleiding tot twee vergelijkingen. Ook de continuïteit van de afgeleide van de golffunctie in $y = 0$ wordt gebruikt, wat maakt dat er een stelsel van vier vergelijkingen is ter bepaling van de vier onbekenden $r = c_1$, d_1, a_2, $t = b_2$:

$$\begin{aligned}0 &= 1+r+d_1-a_2-t,\\ 0 &= \frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_2^2+i\nu_e\hbar k_2]+r\frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_3^2+i\nu_e\hbar k_3]+d_1\frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_4^2+i\nu_e\hbar k_4]-\\ &\quad a_2\frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_1}^2+i\nu_e\hbar k'_1]-t\frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_2}^2+i\nu_e\hbar k'_2],\\ 0 &= k_2+k_3r+k_4d_1-k'_1a_2-k'_2t,\\ 0 &= k_2\frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_2^2+i\nu_e\hbar k_2]+k_3r\frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_3^2+i\nu_e\hbar k_3]+k_4d_1\frac{1}{E-\lambda}[\frac{\hbar^2}{2m_e}k_4^2+i\nu_e\hbar k_4]-\\ &\quad k'_1a_2\frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_1}^2+i\nu_e\hbar k'_1]-k'_2t\frac{1}{E-\lambda-V}[\frac{\hbar^2}{2m_e}{k'_2}^2+i\nu_e\hbar k'_2].\end{aligned} \tag{92}$$

4.7.3 Stroomdichtheid

Ook ditmaal moet de uitdrukking voor de stroomdichtheid opnieuw afgeleid worden. Later wordt van deze uitdrukking weer gebruik gemaakt om de transmissie-waarschijnlijkheid te berekenen. In deze afleiding wordt nog altijd uitgegaan van loodrechte inval op de stap en verder wordt ook de parameter λ aan nul gelijkgesteld. De vergelijking waaraan de golffunctie voldoet, vereenvoudigt dan tot:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = [\frac{\hbar^2}{2m_e}k_y^2\sigma_x+\nu_e\hbar k_y\sigma_y]\Psi = H\Psi. \tag{93}$$

In bovenstaande formule wordt gebruik gemaakt van de Pauli matrices σ_x en σ_y, respectievelijk gelijk aan $\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$ en $\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}$. Voor de stroomdichtheid leidt dit, via de stappen die werden uitgeschreven in sectie 4.6.3, tot vergelijking (94):

$$j_y = \frac{-i\hbar}{2m_e}(\Psi^\dagger\sigma_x(\partial_y\Psi)-(\partial_y\Psi^\dagger)\sigma_x\Psi)+\nu_e(\Psi^\dagger\sigma_y\Psi). \tag{94}$$

Ook hier kan opgemerkt worden dat de gevonden dichtheid het juiste limietgedrag vertoont (indien $\nu_e \to 0$, wordt het Dirac-aandeel geëlimineerd en omgekeerd, indien $m_e^{-1} \to 0$ wordt het Schrödinger-gedeelte uitgesloten.

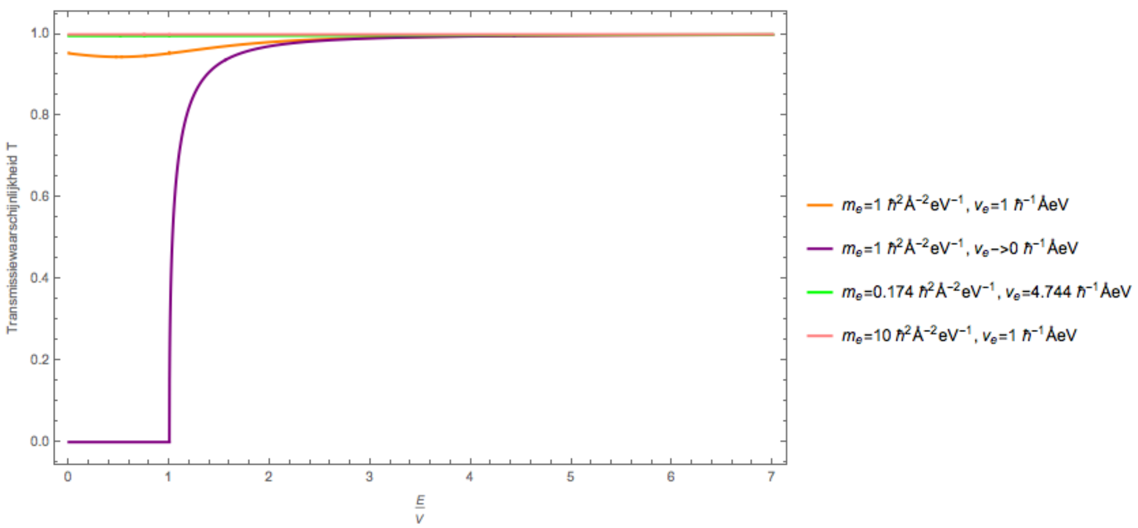
4.7.4 Transmissiewaarschijnlijkheid

Gebruik makend van vergelijking (94), die de stroomdichtheid definieert voor deze probleemsituatie, is het mogelijk een analytische uitdrukking voor de transmissiewaarschijnlijkheid te bekomen. Dit resulteert in:

$$\begin{aligned} T &= \frac{j_t}{j_i}, \\ &= |t|^2 \frac{E}{E-V} \frac{\left(\frac{\hbar^3 k_2'^3}{m_e^2} + 2\nu_e^2 \hbar k_2'\right)}{\left(\frac{\hbar^3 k_2^3}{m_e^2} + 2\nu_e^2 \hbar k_2\right)}. \end{aligned} \tag{95}$$

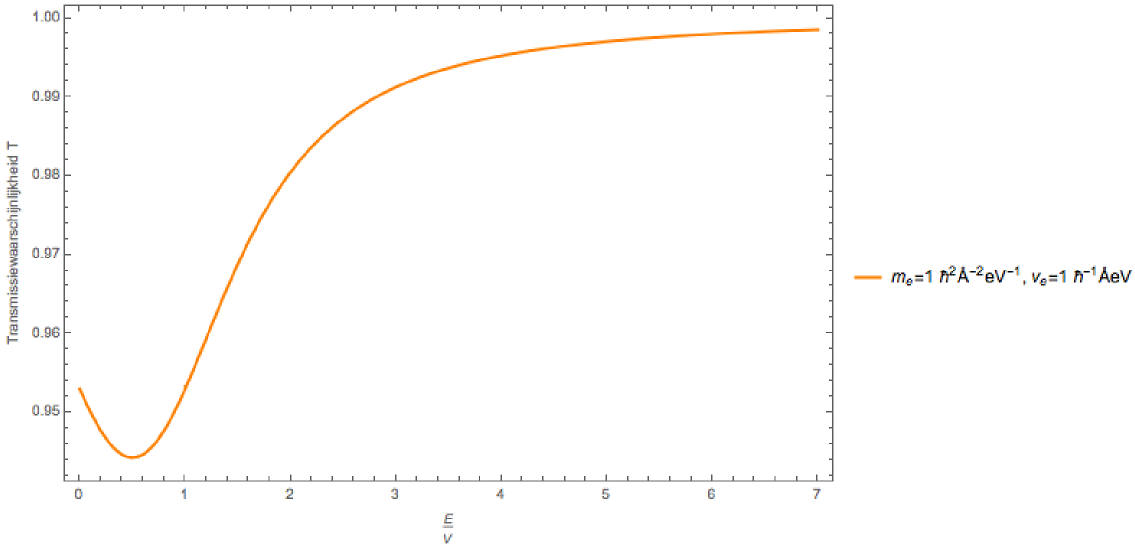
Aan de hand van deze formule worden opnieuw enkele plots gegenereerd. Om na te gaan wat het effect is van de karakteristieke waarden m_e en ν_e, worden deze plots gemaakt voor verschillende waarden van deze parameters. Verwacht wordt dat afname van de inverse massa-parameter zal leiden tot een transmissie die sterk gelijkt op de transmissie die werd waargenomen bij loodrechte inval op de potentiaalstap in het geval van grafeen. In het grafeen-geval was er volledige transmissie, ongeacht de waarde van de energie. De waarde van de groepssnelheid laten afnemen zou dan het Schrödingergedrag van de transmissie bevoordelen, wordt verwacht.
Opmerking: Bij het maken van de plots dient men steeds in het achterhoofd te houden dat de juiste golfvectoren geselecteerd moeten worden. Meer bepaald is het cruciaal de groepssnelheid van de golven in acht te nemen.

Volgende figuur (figuur 29) toont de curves voor de transmissiewaarschijnlijkheden van vier verschillende sets van parameters.



Figuur 29: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting voor borofeen, in functie van de energie voor verschillende waarden van de parameters m_e en ν_e.

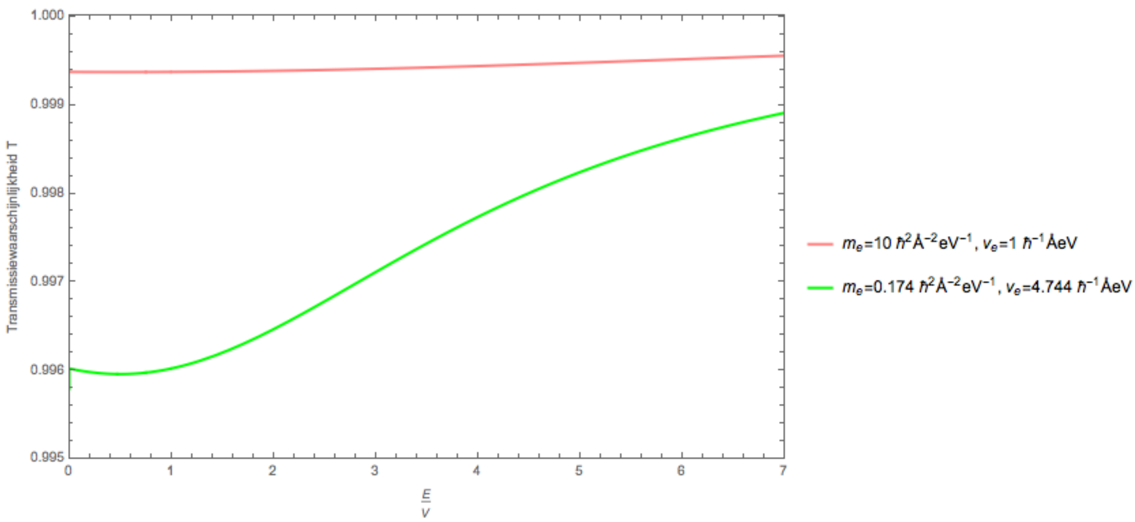
Uit bovenstaande figuur (figuur 29) blijkt dat, indien aan beide parameters een even groot gewicht wordt gegeven (de oranje curve toont dit), de transmissie vanaf $\frac{E}{V} = 1$ snel stijgt naar $T = 1$. Voor $\frac{E}{V} < 1$ verschijnt er een dipje in het verloop van de curve. Om dit duidelijker te kunnen tonen, wordt ingezoomd op de grafiek. Deze plot verschilt heel duidelijk van de plot die voor de potentiaalstap in de vorige sectie werd gemaakt en toont bijgevolg ook aan dat er geen symmetrie is bij rotatie van het systeem over 90°.



Figuur 30: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting voor borofeen, in functie van de energie, met $m_e = 1\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$ en $v_e = 1\hbar^{-1} \AA eV$.

De paarse curve in figuur 29 toont wat er gebeurt wanneer het aandeel van het Dirac-gedrag achterwege wordt gelaten, door de snelheidsparameter naar nul te laten gaan. Zoals verwacht, zal de transmissiewaarschijnlijkheid pas verschillen van nul wanneer er voldoende energie is, namelijk wanneer $\frac{E}{V} \geq 1$. Vanaf die waarde evolueert de waarschijnlijkheid naar $T = 1$.

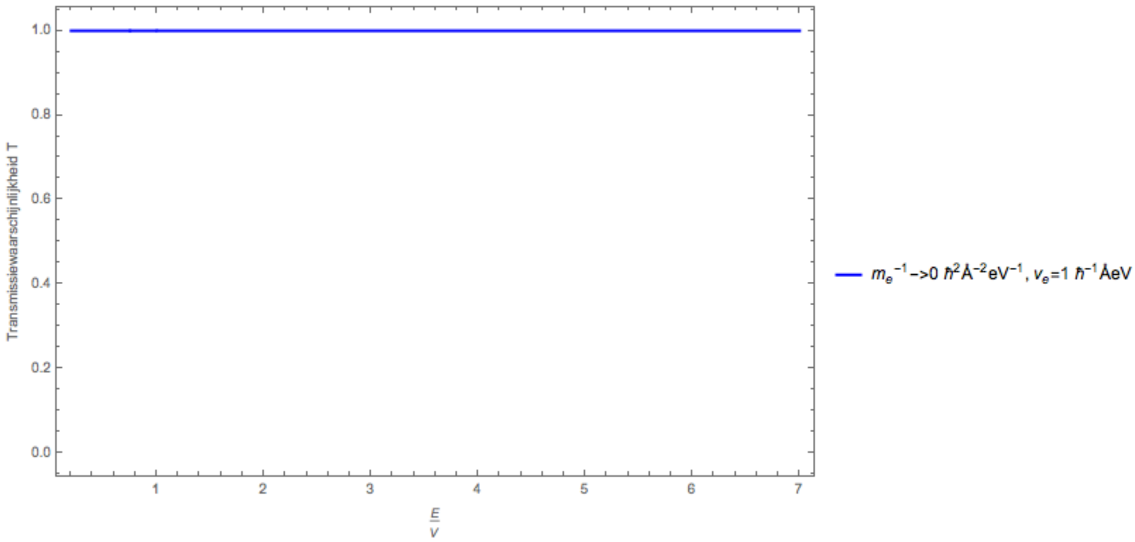
Zowel de groene als de roze curve, met respectievelijke waarden van de parameters $m_e = 0.174\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$; $v_e = 4.744\hbar^{-1} \AA eV$ en $m_e = 10\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$; $v_e = 1\hbar^{-1} \AA eV$, lijken in figuur 29 bij een transmissie te horen die niet afwijkt van de waarde $T = 1$. Om dit gedrag nauwkeuriger te kunnen waarnemen, wordt in figuur 31 ingezoomd op deze twee curves.



Figuur 31: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting voor borofeen, in functie van de energie voor verschillende waarden van de parameters m_e en v_e.

Uit figuur 31 blijkt inderdaad dat de twee waarschijnlijkheden slechts een fractie afwijken van volledige transmissie. Beide curven vertonen wel een stijgend gedrag.

Omwille van de duidelijkheid wordt in figuur 32 de curve, die toont wat er gebeurt als de inverse massa-parameter kleiner wordt genomen, zodanig dat het aandeel van Dirac in dit geval zal overwegen, apart geplot.



Figuur 32: Transmissiewaarschijnlijkheid voor een potentiaalstap met translatiesymmetrie in de x-richting voor borofeen, in functie van de energie, met $m_e^{-1} \rightarrow 0\hbar^2 \AA^{-2} eV^{-1}$ en $v_e = 1\hbar^{-1} \AA eV$.

Ook hier wordt aan de hierboven geformuleerde verwachtingen voldaan; net als bij grafeen geldt er voor loodrechte inval op de potentiaalstap dat volledige transmissie optreedt, voor elke waarde van de energie.

5 Conclusies

Een dubbellaag borofeen met hexagonale structuur, waarvan de twee lagen verbonden zijn door zuiltjes, behoort tot de groep der topologische semi-metalen. Het materiaal beschikt, net als gelijkaardige tweedimensionale semi-metalen, over belangrijke eigenschappen, wat het onderzoek naar zulke materialen interessant maakt omwille van hun rol in het tot stand komen van quantum-apparatuur.
De Hamiltoniaan van borofeen, een semi-metaal met node lijn, werd gebruikt als uitgangspunt voor het onder de loep nemen van de transmissie- en reflectie-eigenschappen van dit materiaal. Hierbij is het belangrijk op te merken dat de Hamiltoniaan een samenraapsel is van een deel dat zich gedraagt volgens de Schrödinger-Hamiltoniaan en een deel dat zich gedraagt volgens de Dirac-Hamiltoniaan. Aan elk van deze delen kan men een parameter relateren. Voor het Schrödinger-deel is dit de inverse massa-parameter $\frac{1}{m_e}$ en voor het Dirac-deel de snelheidsparameter ν_e. De waarden van deze parameters bepalen welk gedeelte overheersend zal zijn in de Hamiltoniaan.
Omwille van de twee aanwezige delen in de Hamiltoniaan werd in de eerste twee secties van dit werk aandacht geschonken aan de transmissie-waarschijnlijkheid die hoort bij een eendimensionale potentiaalstap voor een tweedimensionaal elektronengas enerzijds en voor de elektronen in grafeen anderzijds. Hiervoor werden dan de reeds gekende resultaten teruggevonden en geplot. In het geval van grafeen, waar het gedrag van de elektronen beschreven wordt door de Dirac-vergelijking, wordt het Klein-effect waargenomen. Bij loodrechte inval op de potentiaalstap is de kans op reflectie gelijk aan nul; er treedt volledige transmissie op, ongeacht de waarde van de energie. Eenzelfde procedure werd gevolgd voor de eendimensionale potentiaalbarrière. In dit geval traden er resonanties op in de transmissiewaarschijnlijkheid, wanneer de breedte van de barrière gelijk was aan een geheel veelvoud van de helft van de golflengte van de invallende golf.

In de aanloop naar het berekenen van de transmissiewaarschijnlijkheid werd aandacht geschonken aan het gedrag van de energie-eigenwaarden van borofeen. Een van deze eigenwaarden, E_c, correspondeert met het gedrag van de elektronen in borofeen, de tweede eigenwaarde, E_v, stelt de energie van de gaten voor. Deze eigenwaarden vertonen een trigonale symmetrie wanneer ze geplot worden in functie van de longitudinale en transversale componenten van de golfvector. In drie dimensies is de vorm van de energieën te beschrijven als een kegel met een driehoekig karakter. De kegels zijn ten opzichte van elkaar geroteerd over 180 graden en hun top kent bovendien een tegengestelde zin. Het trigonale karakter van de eigenwaarden wordt sterk beïnvloed door de karakteriserende parameters, m_e en ν_e. In het bijzonder zal het laten dalen van de waarde van de inverse massa-parameter de trigonale symmetrie doen verdwijnen; de eigenwaarden beschikken nu over een sferische symmetrie. Analoog dooft het trigonale karakter uit bij het verlagen van de snelheidsparameter. Het modificeren van de parameters zodanig dat de inverse massa-parameter een grotere rol speelt, zorgt dan weer voor een meer opvallende manifestatie van de trigonaliteit. Het verhogen van de snelheidsparameter maakt echter dat de trigonaliteit verdwijnt.
De twee trigonale kegels zullen overlap vertonen met elkaar. Deze overlap zorgt dat er een snijlijn tot stand komt, zijnde de node lijn. Het voorschrift van de node lijn werd ook berekend in dit werk.

Omwille van de symmetrie van het systeem, was het zinvol na te gaan op welke manier de resultaten van de transmissiewaarschijnlijkheid zouden verschillen bij het beschouwen van een potentiaalstap met translatie-symmetrie in de y-richting enerzijds en een stap met translatie-symmetrie in de x-richting anderzijds. Hiertoe werden de golffunc-

ties opgesteld, corresponderend met beide gevallen. Verder moest ook de stroomdichtheid analytisch bepaald worden. Een analytische uitdrukking voor de transmissiewaarschijnlijkheid werd op basis daarvan bekomen, voor beide probleemgevallen. Hierbij werd enkel het geval zonder hoekafhankelijkheid in beschouwing genomen, er werd enkel gekeken naar loodrechte inval op de potentiaalstap. Het was interessant na te gaan hoe modificatie van eerder genoemde parameters, m_e en v_e, het gedrag van de transmissie beïnvloedt. Uit de resultaten blijkt dat voor het zuiver Schrödinger-geval enkel vanaf voldoende hoge energiewaarden transmissie optreedt. Dit wil zeggen dat, indien de snelheidsparameter aan nul gelijkgesteld wordt, de transmissiewaarschijnlijkheid pas verschillend wordt van nul wanneer de verhouding $\frac{E}{V}$ groter is dan één. Voor het zuivere Dirac-geval wordt waargenomen dat de transmissiewaarschijnlijkheid steevast gelijk is aan één, wat overeenstemt met de verwachting bij loodrechte inval op de potentiaalstap, uitgaande van de verkregen resultaten bij grafeen. In tussenliggende gevallen blijkt de curve die de transmissiewaarschijnlijkheid weergeeft een gedrag te vertonen dat zich tussen de net beschreven uitersten bevindt. Afhankelijk van welke parameter de overhand neemt, zal de curve meer neigen naar één van de twee uitersten.
Uit de resultaten bleek verder dat de transmissiewaarschijnlijkheid die berekend wordt voor de potentiaalstap met translatie-symmetrie in de y-richting verschilt van de waarschijnlijkheid die hoort bij de stap met translatie-symmetrie in de x-richting. Dit is te wijten aan het feit dat het systeem geen (x, y)-symmetrie bezit.

Als vervolg op dit werk zou het interessant zijn te onderzoeken wat er gebeurt als men een potentiaalstap met eindige breedte, i.e. een potentiaalbarrière zou beschouwen. Daarnaast kan het de moeite waard zijn om de hoekafhankelijkheid in rekening te brengen en bijvoorbeeld te beschouwen wat er gebeurt indien de potentiaalstap langs een andere as ligt, die een bepaalde hoek maakt met de coördinaat-assen. Het materiaal borofeen leent zich bijgevolg uitstekend voor verder onderzoek.

6 Dankwoord

Tenslotte zou ik graag mijn promotor, Prof. Dr.Peeters, en mijn begeleider, Dr. Ben Van Duppen, bedanken voor alle hulp gedurende het afgelopen jaar, zodat deze bachelorproef tot een goed einde gebracht kon worden.

Referenties

[1] https://www.sciencedaily.com/releases/2018/12/181203131102.htm, *Geraadpleegd op 27/04/2019*

[2] NAKHAEE, M., KETABI, and S.A., PEETERS, F., *Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding model and low-energy effective Hamiltonian.* Physical Review B **98**, 115413 (2018)

[3] https://arxiv.org/abs/1810.08186, *Geraadpleegd op 27/04/2019*

[4] PEETERS, F., *Inleiding kwantummechanica.* Antwerpen, 2017, 133 p.

[5] http://www.quantumuniverse.nl/een-wonder-je-potlood, *Geraadpleegd op 21/04/2019*

[6] http://www.grafeen.be/wat-is-grafeen/, *Geraadpleegd op 21/04/2019*

[7] https://www.agconnect.nl/artikel/inkt-met-grafeen-kan-chips-printen, *Geraadpleegd op 21/04/2019*

[8] https://nl.wikipedia.org/wiki/Grafeen, *Geraadpleegd op 21/04/2019*

[9] https://tweakers.net/nieuws/106937/goed-geleidend-alternatief-voor-grafeen-\ geproduceerd.html, *Geraadpleegd op 31/03/2019*

[10] https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.4951692, *Geraadpleegd op 31/03/2019*