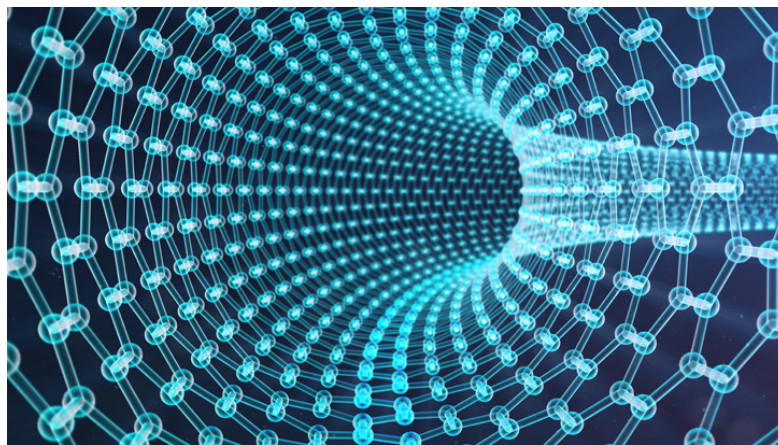


07/06/2019

"Klein tunneling": un fenómeno exótico con implicaciones en la velocidad de los dispositivos electrónicos de grafeno



Debido a sus propiedades extraordinarias, el grafeno se estudia como un material nuevo muy prometedor para la electrónica. La dinámica de electrones en el grafeno está modelada por la ecuación de Dirac que presenta un fenómeno exótico de túneles llamado "Klein tunneling": una transmisión perfecta de electrones cuando éstos inciden perpendicularmente a una barrera de potencial (independientemente de la altura de la barrera).

Estructura molecular del grafeno.

En este trabajo argumentamos que la explicación Bohmiana de los fenómenos cuánticos proporciona un formalismo muy apropiado para discutir los tiempos de túnel, ya que la teoría ortodoxa (usual) de la mecánica cuántica es ambigua en la definición de tiempo de túnel tal y como mencionó John Bell: "[La mecánica bohmiana] es, en mi opinión, muy instructiva. Es equivalente experimentalmente a la versión habitual en la medida en que esta última no es ambigua." Las dificultades de la teoría ortodoxa para la descripción del tiempo de túnel aparecen porque la propia teoría no es capaz de decidir dónde está el electrón sin medirlo explícitamente. A pesar de esta ambigüedad conceptual ortodoxa, los tiempos de túnel son de gran importancia práctica para la industria electrónica porque están vinculados a las frecuencias

de corte, es decir, a la velocidad máxima de los dispositivos electrónicos. La teoría Bohmiana permite una definición precisa de las posiciones de los electrones en términos de trayectorias Bohmianas, independientemente de su medida (figura 1). La ventaja más importante de la computación Bohmiana del llamado "dwell time" para aplicaciones electrónicas de alta frecuencia es su capacidad, no sólo para distinguir entre los electrones transmitidos (N_T) y reflejados (N_R^*), sino también para discernir aquellas partículas reflejadas que pasan algún tiempo en la barrera (N_R). Dado que esta distinción no es posible en la mecánica cuántica ortodoxa, es por eso que la discusión de los tiempos de túnel y de las frecuencias de corte se convierten en ambigüedades / controvertidas con esta teoría habitual.

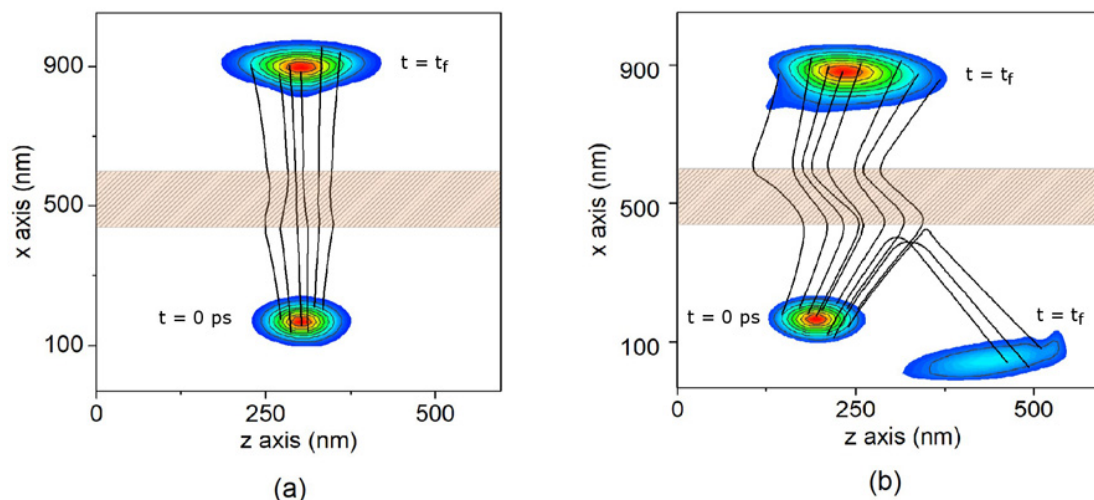


Figura 1. (a) La función de onda condicional del electrón que incide perpendicularmente a una barrera en el grafeno (en la región de naranja sombreada), junto con el conjunto de las trayectorias de Bohmian asociadas, se representan en los tiempos iniciales y finales calculados a partir del simulador BITLLES. Como se puede ver, tanto el paquete de onda como en el conjunto de trayectorias, el electrón exhibe el fenómeno de "Klein tunneling" y todas las trayectorias atraviesan la barrera. (b) La misma trama de un electrón que afecta a la barrera en un ángulo diferente. Ahora, no hay un túnel Klein completo y parte del paquete de onda, y algunas trayectorias, se reflejan. La parte transmitida del paquete de onda y las trayectorias transmitidas siguen una expresión similar a la ley de Snell óptica.

Consideramos un dispositivo de grafeno de dos terminales, la estructura de la cual (energía del punto de Dirac en función de la posición x) se dibuja en la figura 2. La naturaleza de onda de los electrones viene dada por un bispinor solución de la ecuación de Dirac.

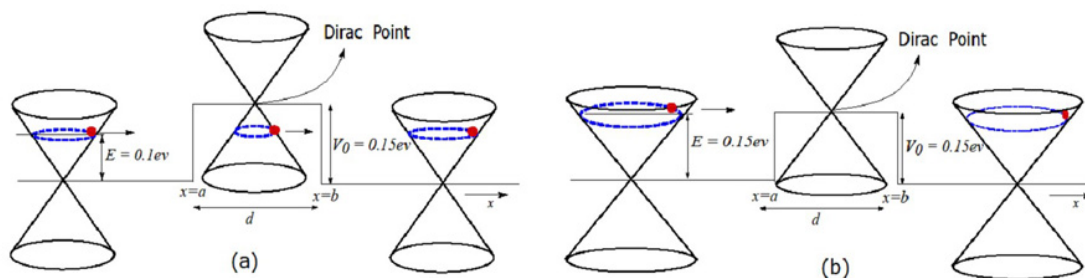


Figura 2. (a) Zona de barrera de túneles de Klein donde el electrón, que incide perpendicularmente a la barrera, tiene una energía E menor que la altura de la barrera V_0 . Los conos representan la dispersión de momentos y de energías del grafeno en diferentes posiciones. El electrón dispone de estados disponibles en la banda de valencia de la región de la barrera (energía cinética negativa) que les permite túnel libre. El coeficiente de transmisión en estos casos se encuentra próximo a la unidad. (b) La misma trama para un electrón con energía similar a la altura de la barrera $E = V_0$. En este caso, el electrón debe ocupar el punto de Dirac en la región barrera que casi no dispone de estados energéticos disponibles. En estos escenarios la probabilidad de transmisión casi desaparece.

El cálculo correcto del tiempo de permanencia (o "dwell time") a través de las trayectorias de Bohmian se calcula mediante el uso del simulador BITLLES. En la figura 3 (a) mostramos como el número de estas trayectorias varía con el ángulo de incidencia ($\theta_{\vec{k}_c}$), las simulaciones muestran que para $\theta_{\vec{k}_c} = 0$, se transmiten casi todas las partículas. Aumentar ($\theta_{\vec{k}_c}$) conduce a un aumento de las partículas reflejadas. Por construcción, el comportamiento de N_T en la figura 3 (a) reproduce el coeficiente de transmisión T de la figura 3 (b). La estimación del retraso actual en un dispositivo electrónico sólo tiene en cuenta las partículas que entran en la barrera, ya sea N_T o N_R . Por lo tanto, para una descripción inequívoca de los tiempos de túnel, es muy importante clasificar y descartar la contribución de las trayectorias N_R^* que no contribuyen a la corriente de electrones que luego determina los tiempos de túnel. En la computación ortodoxa, sólo con el bispinor (sin trayectorias), N_T , N_R y N_R^* no se pueden tratar por separado y la mencionada ambigüedad ortodoxa aparece.

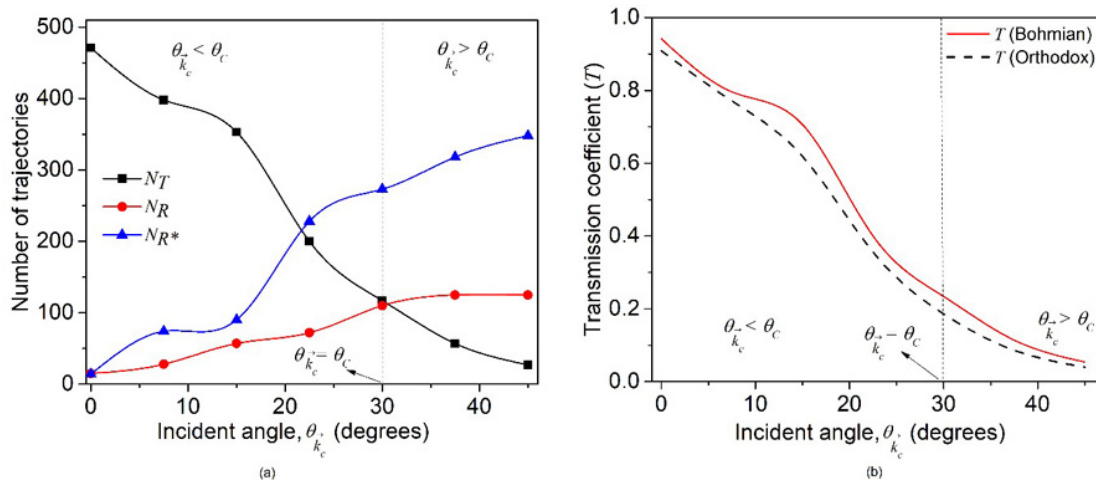


Figura 3. (a) Número de partículas transmitidas, N_T , partículas que entran a la barrera pero que eventualmente se reflejan, N_R y partículas que se reflejan antes de entrar a la barrera N_{R^*} en función del ángulo de incidencia. (b) Coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia calculado a partir de la mecánica cuántica ortodoxa (línea negra discontinua) y de las trayectorias de Bohmian (línea roja sólida).

En conclusión, hemos demostrado la capacidad de la mecánica Bohmiana para hablar de los tiempos de túnel en el grafeno y mostramos que los electrones con energías cinéticas positivas o negativas en estos materiales pueden moverse en dirección arbitraria, pero con una velocidad constante (Fermi) debido a que el llamado "Klein tunneling" es, de hecho, no un fenómeno túnel genuino, sino un fenómeno de interferencia de ondas.

Devashish Pandey, Xavier Oriols

Departamento de Ingeniería Electrónica

Universidad Autónoma de Barcelona

Xavier.Oriols@uab.cat

Referencias

Pandey, Devashish & Villani, Matteo & Colomés, Enrique & Zhan, Zhen & Oriols, Xavier. (2018).

Implications of the Klein tunneling times on high frequency graphene devices using

Bohmian trajectories. *Semiconductor Science and Technology*. DOI: [10.1088/1361-6641/aae85c](https://doi.org/10.1088/1361-6641/aae85c).

[View low-bandwidth version](#)