

**CRYSTTIAN ARANTES PAIXÃO**

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS DE BAIXA  
DIMENSIONALIDADE**

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

LAVRAS  
MINAS GERAIS - BRASIL  
2006

**CRYSTTIAN ARANTES PAIXÃO**

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS DE BAIXA  
DIMENSIONALIDADE**

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Área de Concentração:  
Física do Estado Sólido

Orientador:  
Prof. Sérgio Martins de Souza – DEX

Co-orientador:  
Prof. Antonio Tavares da Costa Júnior – DEX

LAVRAS  
MINAS GERAIS - BRASIL  
2006

**CRYSTTIAN ARANTES PAIXÃO**

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS DE BAIXA  
DIMENSIONALIDADE**

Monografia de graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do curso de Ciência da Computação para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Aprovada em 20 de setembro de 2006

---

Prof<sup>a</sup>. Iraziet da Cunha Charret

---

Prof. José Monserat Neto

---

Prof. Sérgio Martins de Souza  
(Orientador)

---

Prof. Antonio Tavares da Costa Junior  
(Co-orientador)

LAVRAS  
MINAS GERAIS – BRASIL

*Aos meus avós Gabriel e Maria Isabel, aos meus pais Osvaldo e Cássia, aos meus irmãos Emanuelle e Richard e aos meus grandes amigos.*

## **Agradecimentos**

*Primeiramente agradeço a Deus por ter me dado a coragem necessária para atingir o meu objetivo de finalizar este curso; por ter me dado forças para enfrentar os obstáculos e por ter orientado em muitas decisões. Agradeço aos colegas, professores, ao Grupo de Física do DEX/UFLA e ao meu Orientador Antonio Tavares da Costa Jr que foram de grande importância em minha graduação. Agradeço a minha família, por ter me incentivado a nunca desistir de meus sonhos, em especial ao meu avô Gabriel que sempre considerei um pai, a minha saudade e gratidão.*

## RESUMO

Os fenômenos de transporte eletrônico são essenciais, tanto para a compreensão das propriedades mais fundamentais da matéria, quanto para o desenvolvimento de aplicações tecnológicas. O transporte eletrônico é o movimento médio de uma grande quantidade de elétrons numa mesma direção e sentido, formando o que identificamos macroscopicamente como corrente elétrica. Todos os dispositivos computacionais em funcionamento atualmente utilizam-se do transporte eletrônico para armazenar e processar informação. Nesta monografia estudamos o transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade, descrevendo-o através de modelos simples. O número reduzido de dimensões espaciais faz com que a matemática destes modelos seja mais simples que a de sistemas tridimensionais. Os sistemas estudados foram modelados por seqüências de barreiras quânticas, ou seja, variações espaciais relativamente abruptas da energia potencial. Esse tipo de sistema tem sido intensamente estudado nas últimas duas décadas devido às propriedades peculiares advindas do confinamento eletrônico e, principalmente, devido ao fato de que as novas tecnologias de fabricação de materiais têm permitido confecção de sistemas com dimensões cada vez mais reduzidas. A análise do transporte eletrônico nestes modelos foi feita através do cálculo do coeficiente de transmissão. O comportamento do coeficiente de transmissão como função da energia mostra assinaturas de interferências quânticas, tunelamento e formação de níveis discretos de energia.

## ABSTRACT

The electronic transport phenomena are of fundamental importance in understanding the basic properties of matter. They also play essential part on the development of new technological applications. Electronic transport is average movement of a large amount of electrons in one given direction, forming what is identified macroscopically as an electric chain. All computational devices in operation today use electronic transport to store and process information. In this work we studied electronic transport in system of low dimensionality and described through simple models. The reduced number of space dimensions makes the mathematics of the models, simpler than those of three-dimensional systems. The systems were modeled by sequences of quantum barriers, that is, relatively abrupt space variations of the potential energy. That kind of system has been studied intensely in last the two decades due to the peculiar properties originating from the electronic confinement. Also important is the fact that the new technologies of materials production have been allowing the fabrication of system of even more dimensions. The electronic transport in these models has been analyzed through the calculation of the transmission coefficient. The behavior of the transmission coefficient as function of energy shows signatures of quantum interferences, tunneling and formation of discrete levels of energy.

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS .....	viii
1 INTRODUÇÃO .....	1
2 A FÍSICA QUÂNTICA E A ESTRUTURA DA MATÉRIA.....	3
2.1 Introdução .....	3
2.2 Radiação de Corpo Negro.....	4
2.3 Efeito Fotoelétrico.....	8
2.4 O Espectro Atômico .....	10
2.5 Dualidade Onda-Partícula.....	12
2.6 A Hipótese de De Broglie.....	14
2.7 A Equação de Schrödinger .....	14
2.7.1 Equação de Schrödinger: Separação de Variáveis .....	16
2.7.2 Princípio da Superposição.....	18
2.8 Composição da Matéria.....	19
2.8.1 Átomo .....	19
2.8.2 Estrutura da Matéria .....	20
2.8.3 Modelo da Mecânica Quântica ou Mecânica Ondulatória para o Átomo (1924-1927).....	21
2.8.4 Princípio da Incerteza de Heisenberg .....	22
2.8.5 Moléculas.....	22
2.8.6 Sólidos .....	23
2.8.7 Estrutura Cristalina.....	25
3 MODELOS SIMPLIFICADOS PARA SISTEMA DE BAIXA DIMENSIONALIDADE .....	30
3.1 Barreira de Potencial Retangular .....	30
3.2 Barreira de Potencial Triangular .....	35
3.3 Dupla Barreira de Potencial Retangular.....	40
3.4 Dupla Barreira de Potencial Triangular.....	44
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	50
4.1 Barreira de Potencial Retangular .....	50
4.2 Barreira de Potencial Triangular .....	51
4.3 Dupla Barreira de Potencial Retangular.....	53
4.4 Dupla Barreira de Potencial Triangular.....	54
5 CONCLUSÕES .....	57
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	58



## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Distribuição espectral da radiação térmica.....	5
Figura 2.2 - Sistema de Fotocélula. ....	8
Figura 2.3 - Espectro do Hidrogênio .....	11
Figura 2.4 - Aparelho usado para medir o espectro atômico.....	12
Figura 2.5 - Experimento de Young para luz .....	13
Figura 2.6 - Representação esquemática de um átomo.....	21
Figura 2.7 - Modelo de molécula.....	22
Figura 2.8 - Modelo de Simetria de um cristal.....	24
Figura 2.9 - Modelo de Simetria de um cristal.....	25
Figura 2.10 - Parte superior: ilustração de um modelo clássico de um átomo, os pontos individuais representam elétrons, enquanto que os traços indicam as órbitas. Parte inferior: nuvem de elétrons vem indicada pelo anel sombreado. Os pontos representam os elétrons. ....	26
Figura 2.11 - Um elétron de valência não pode normalmente escapar no interior do sólido .....	27
Figura 2.12 - Diagrama de energia de um elétron de valência de um sólido se apresenta como na figura. ....	28
Figura 3.1 - Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial $V_A$ é menor que o potencial $V_B$ .....	31
Figura 3.2 - Equações de onda definidas por regiões de uma barreira de potencial retangular.....	32
Figura 3.3 - Barreira de Potencial formada por átomos A, B e C, sendo que o potencial $V_A$ é menor que o potencial $V_B$ e este menor que o $V_C$ .....	35
Figura 3.4 - Barreira Triangular com ondas de propagação por região.....	36
Figura 3.5 - Dupla Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial $V_A$ é menor que o potencial $V_B$ .....	41
Figura 3.6 - Dupla Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial $V_A$ é menor que o potencial $V_B$ .....	42
Figura 3.7 - Dupla Barreira de Potencial Triangular formada por átomos A, B e C, sendo que o potencial $V_A$ é menor que o $V_B$ e este menor que o $V_C$ .....	45

Figura 3.8 - Dupla Barreira Retangular com ondas de propagação por região.....	46
Figura 4.1- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura 0.5, 1.5, 2.5 e 3.5 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. A linha tracejada representa a altura da barreira, $V_0$ . .....	50
Figura 4.2 - Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura 0.5, 1.5, 2.5 e 3.5 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. A linha tracejada representa a altura da barreira, $V_0$ . .....	52
Figura 4.3 - Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 5.0 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. ....	54
Figura 4.4 - Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 0.5 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente.....	55
Figura 4.5 - Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 5.0 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. ....	56

# 1 INTRODUÇÃO

A Mecânica Quântica, que é um dos pilares fundamentais da física atual, foi formulada no início do século XX. Houve a necessidade de sua criação devido à incapacidade da física clássica em explicar os resultados das novas experiências, que exploravam as propriedades da matéria, até então inacessíveis por falta da tecnologia adequada.

A formulação da mecânica quântica foi uma grande contribuição para o avanço científico, pois a partir de lá resultados experimentais como efeito fotoelétrico, a radiação do corpo negro e os espectros dos átomos puderam ser compreendidos qualitativa e quantitativamente.

Um dos principais constituintes da matéria no nível subatômico é o elétron. Descoberto por Thomson em 1897, este é uma partícula sem estrutura interna (“pontual”), com carga  $e = -1,602177 \cdot 10^{-19} C$  e  $m = 9.10 \times 10^{-31} \text{ kg}$  de massa. O comportamento dos elétrons é responsável por uma parcela considerável das propriedades da matéria em praticamente todos os seus estados.

Neste trabalho estudamos um aspecto particular do comportamento eletrônico, conhecido como transporte. O transporte eletrônico é o movimento médio de uma grande quantidade de elétrons numa mesma direção e sentido, formando o que identificamos macroscopicamente como uma corrente elétrica. As propriedades de transporte da matéria são fundamentais tanto para a ciência básica, quanto para aplicações tecnológicas. Todos os dispositivos computacionais em funcionamento atualmente utilizam-se do transporte eletrônico para armazenar e processar informação.

Estamos interessados, em especial, no transporte eletrônico em sistemas de baixa dimensionalidade. Este tipo de sistema tem sido intensamente estudado nas últimas duas décadas devido às propriedades peculiares advindas do confinamento eletrônico e, principalmente, devido ao fato de que as novas tecnologias de fabricação de materiais têm permitido a confecção desses sistemas com dimensões cada vez mais reduzidas.

Um aspecto interessante do sistema de baixa dimensionalidade é a simplicidade dos modelos que se utilizam para descrevê-los. O número reduzido de dimensões espaciais faz

com que a matemática destes sistemas seja, em geral, mais simples que a de sistemas tridimensionais.

Nesta monografia estudaremos modelos para sistemas quase-unidimensionais formados por seqüências de barreiras quânticas, ou seja, variações espaciais relativamente abruptas da energia potencial. Relativamente abruptas porquê representam variações rápidas na escala do comprimento de onda típico do elétron em sólidos. Estes sistemas vêm sendo estudados como candidatos à fabricação de novos elementos de micro circuitos.

No Capítulo 2 apresentaremos alguns aspectos experimentais que levaram a formulação da mecânica quântica, seus principais conceitos e alguns fatos relevantes sobre a estrutura da matéria. No Capítulo 3 apresentaremos os modelos que estudamos e a sua relação com sistemas reais. No Capítulo 4 apresentaremos os resultados obtidos a partir dos modelos do Capítulo 3. No Capítulo 5 apresentaremos nossos comentários finais.

# 2 A FÍSICA QUÂNTICA E A ESTRUTURA DA MATÉRIA

## 2.1 Introdução

No fim do século XIX ocorreu uma sistematização do conhecimento sobre a física clássica, uma grande síntese em torno da mecânica de Newton e da eletrodinâmica de Maxwell. A sistematização do conhecimento sobre a física clássica começou com os trabalhos de Galileu, envolvendo o movimento e estabelecendo a necessidade da experimentação na física. Seus trabalhos foram intensamente impulsionados pelos de Newton e alcançaram maturidade no final do século XIX.

Nesta época, a física clássica era um conjunto de teorias muito bem sucedidas, apoiadas em firmes bases experimentais, e elegantemente expressas com o auxílio de ferramentas matemáticas bem estabelecidas. Ela lidava com os fenômenos macroscópicos. Seus conceitos eram abstraídos dessa escala, e dela também resultava a intuição, de modo que pudessem ser formadas imagens “intuitivas” desses conceitos com base na experiência cotidiana do ser humano.

Com o desenvolvimento tecnológico crescente no final do século XIX, os físicos experimentais começaram a explorar propriedades da matéria até então inacessíveis. Estes novos experimentos começaram a revelar comportamentos que contradiziam as previsões da física clássica. Eles indicavam que o comportamento da matéria no nível microscópico era muito diferente do seu comportamento macroscópico.

A partir dos resultados de vários experimentos concluiu-se que as teorias da física clássica eram incapazes de descrever, por exemplo, o espectro de radiação emitida por um corpo negro; o efeito fotoelétrico e os espectros dos átomos também não podiam ser explicados pela teoria eletromagnética e a mecânica clássica.

Estes e outros resultados levaram à formulação, no início do século XX, das bases da mecânica quântica. A aplicação dessa teoria a sistemas microscópicos como átomos, moléculas, núcleos atômicos e partículas elementares, e a sistemas macroscópicos (sólidos, líquidos, gases e plasmas) permitiu uma melhor compreensão da natureza e, mais tarde, uma revolução tecnológica.

Essa nova teoria fundamental trata principalmente de fenômenos na escala atômica e subatômica, mais de um milhão de vezes menor que as dimensões macroscópicas, não deixando de tratar também das repercussões desses fenômenos ao nível macroscópico. Sendo esta escala totalmente remota da nossa experiência, não há nenhuma razão para esperar que possa ser descrita pelos conceitos da física clássica.

A formulação da mecânica quântica foi um dos processos mais extensos e radicais de renovação conceitual de toda a história da física, não se limitando aos mecanismos dinâmicos envolvidos nas teorias clássicas, mas exigindo uma revisão da própria base cinemática envolvida na sua formulação. Não só a estruturação dos conhecimentos dos fenômenos proposta pelas teorias anteriores era inadequada, como também os termos usados na própria identificação e caracterização dos fenômenos tiveram que ser revistos.

## **2.2 Radiação de Corpo Negro**

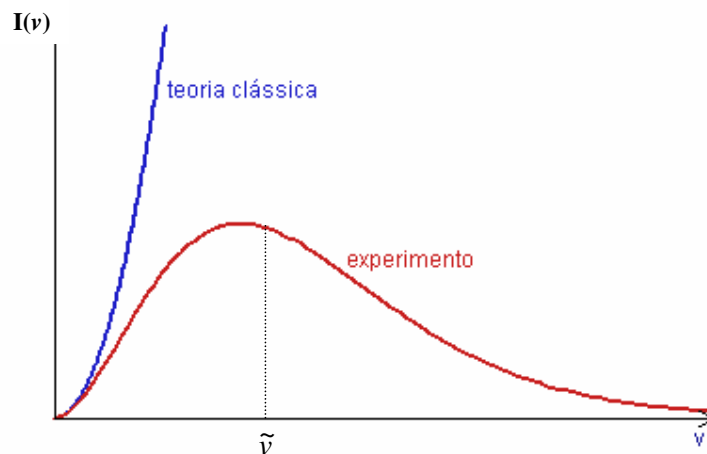
Foi o estudo da radiação térmica emitida por corpos opacos que forneceu os primeiros indícios da natureza quântica da radiação. Quando um corpo opaco recebe radiação, parte dela é refletida e parte dela é absorvida. Uma das características dos corpos de cor clara é refletir a maior parte da radiação visível incidente, enquanto os escuros absorvem a maior parte da radiação. Essa radiação absorvida pelo corpo aumenta a energia cinética dos átomos que o constituem, fazendo-os oscilar mais vigorosamente em torno da sua posição de equilíbrio. Como a temperatura de um corpo é determinada pela energia cinética média dos átomos, a absorção de radiação faz a temperatura do corpo aumentar. Acontece que os átomos contêm partículas carregadas (os elétrons) que são aceleradas pelas oscilações; assim, de acordo com a teoria eletromagnética, os átomos emitem radiação, o que reduz a energia cinética dos átomos e portanto diminui a temperatura. Quando a taxa de absorção é igual à taxa de emissão, a temperatura permanece constante e pode-se dizer que o corpo se encontra em equilíbrio térmico com o ambiente. Assim, um material que é um bom absorvedor de radiação é também um bom emissor.

A radiação eletromagnética emitida nessas circunstâncias é chamada de radiação térmica. Em temperaturas moderadas (abaixo de 600°C), a radiação térmica emitida pelos corpos não é visível; a maior parte da energia está concentrada em comprimentos de onda muito maiores que os da luz visível.

Quando um corpo é aquecido, a quantidade de radiação térmica emitida aumenta e a energia irradiada se estende a comprimentos de onda cada vez menores. Entre 600 e 700°C, existe energia suficiente no espectro visível para que o corpo comece a brilhar com luz própria vermelho-escura. Em temperaturas mais elevadas, o objeto brilha com luz vermelho-clara ou mesmo branca.

À medida que a temperatura de um corpo varia, o aspecto da radiação emitida por esse corpo aquecido também varia. Um maneira simplificada de constatar a existência deste fenômeno é observar o interior de um forno em equilíbrio térmico a uma certa temperatura  $T$ . É percebido a emissão de um feixe de radiação através de um orifício em uma de suas paredes. Trata-se de radiação eletromagnética, cujo espectro pode ser determinado experimentalmente.

A radiação visível passa de uma coloração avermelhada a um vermelho vivo, depois torna-se mais azulada. Essas mudanças de tons de cores acontecem à medida que a temperatura se eleva. O espectro é contínuo, mas com o aumento da temperatura a coloração dominante se desloca para frequências mais elevadas.



**Figura 2.1:** Distribuição espectral da radiação térmica.

Com frequências abaixo do pico, os resultados previstos pela física clássica com mostrado na Figura 2.1 coincidem com os experimentos. Para frequências maiores desviam-se cada vez mais, como é mostrado pela curva azul, informando que a intensidade cresce exponencialmente, distanciando-se cada vez mais da curva experimental (vermelha).

Dentro do forno, o equilíbrio térmico ocorre através de trocas de energia entre a radiação e os átomos nas paredes, à temperatura  $T$ , os átomos absorvem e reemitem a

radiação. A física clássica propõe um modelo para a absorção e emissão de radiação eletromagnética de frequência  $\nu$  por um sistema de cargas (átomo), em que as cargas oscilem de acordo com essa frequência [NUSSENZVEIG].

No final do século XIX, os físicos estavam tentando obter, a partir das leis do Eletromagnetismo, uma equação relacionando  $I$  (intensidade da radiação),  $\nu$  (frequência) e a temperatura que se adaptasse aos resultados experimentais. Esse problema era conhecido como “problema do corpo negro”, pois esse era o nome que se dava a um corpo ideal que emitisse e absorvesse igualmente bem todas as radiações.

Vários físicos tentaram resolver esse problema, sem sucesso. A equação só foi obtida em 1900, pelo alemão Max Planck. Porém para obtê-la, ele teve de fazer uma hipótese ousada – segundo ele, feita por “puro desespero”, pois, na realidade, o próprio Planck não acreditava nela. Essa hipótese foi apresentada na reunião da Sociedade Alemã de Física. De acordo com a física clássica a troca de energia entre a radiação e os átomos nas paredes dá-se de forma contínua, ou seja, qualquer quantidade de energia podia ser absorvida ou emitida.

Primeiro Planck encontrou uma função empírica que produzia os dados experimentais e em seguida descobriu um forma de modificar os cálculos clássicos para obter esta função. Pela análise do orifício, percebe-se que a modificação foi necessária, pois quanto menor o comprimento de onda maior o número de ondas estacionárias.

Classicamente, as ondas eletromagnéticas no interior do orifício são produzidas por cargas elétricas nas paredes, que vibram como osciladores harmônicos simples. É importante lembrar que a radiação emitida por um oscilador harmônico tem a mesma frequência que o próprio oscilador.

Para que os dados coincidissem com os da experiência, Plank postulou que a troca seria “quantizada”, ou seja, um oscilador com frequência  $\nu$  só poderia emitir ou absorver energia em múltiplos inteiros de um “quantum de energia”.

A fórmula foi deduzida de maneira a fazer com que os dados gerados por ela fossem iguais ao da experiência, e é dada por:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (2.1)$$

Está Equação 2.1 é composta por:

$E$  : energia

$h$  : constante de Planck, cujo valor é aproximadamente

$$4,136 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \cong 6,6261 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$



$\nu$ : frequência

$\hbar$ : constante de Planck dividida por  $2\pi$ , sendo seu valor:

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \cong 1,0546 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \cong 6,582 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$$

$\omega$ : frequência angular

O comprimento mínimo de onda para ser visível deve ter o valor aproximado de  $5 \cdot 10^{-7}$  m. Logo, pode-se calcular a energia necessária que deve ser fornecida ao elétron para que ele possa aumentar a sua energia cinética e com isso emitir o comprimento de onda visível.

$$E = h\nu$$

$$E = 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \cdot \nu$$

Calculamos  $\nu$  usando  $c = \nu \cdot \lambda$

$$E = 4,136 \cdot 10^{-15} \cdot \frac{3 \cdot 10^2}{5 \cdot 10^7}$$

$$E = 3,98 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Esta energia na escala macroscópica é pequena, mas na escala atômica assume o valor de

$$E = 2,5 \text{ eV}$$

O valor de  $1 \text{ eV}$  é a quantidade de energia cinética ganha por um único elétron quando acelerado por uma diferença de potencial de um volt, no vácuo. Logo, nota-se que a energia necessária para o elétron emitir a radiação visível não é pequena quando comparada na escala atômica.

No entanto na física clássica, onde a energia de uma oscilação não tem qualquer relação com sua frequência, dependendo apenas da amplitude de oscilação, o postulado de quantização de Planck é incompreensível.

Por muitos anos, Planck procurou uma explicação para o seu postulado dentro da física clássica. Mas acabou convencendo-se de que isso não seria possível.

A hipótese crucial de Planck contradiz frontalmente o que se poderia esperar a partir da mecânica e da eletrodinâmica clássicas. No entanto, as consequências destas teorias clássicas contradizem fatos empíricos. Essa contradição foi tão grave que propiciou a invenção de uma estrutura teórica nova.

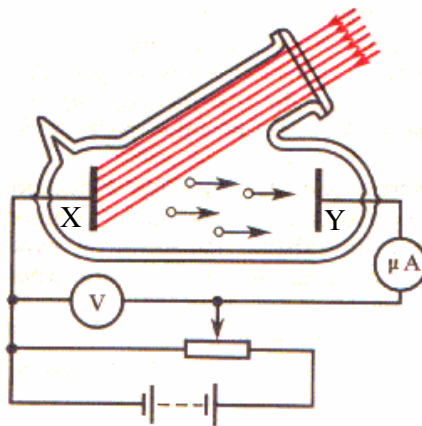
O trabalho de Planck apenas teve o mérito de fornecer o germe inicial que se tornou decisivo para a elaboração da nova teoria. Esta só emergiu de uma forma coerente a partir

dos trabalhos de Heisenberg e Schrödinger, mais de duas décadas depois do passo inicial dado por Planck.

## 2.3 Efeito Fotoelétrico

Em suas experiências de 1887, Heinrich Hertz usou um circuito sintonizado com um centelhador para gerar ondas e um circuito semelhante para detectá-las. Ele produzia uma descarga oscilante fazendo saltar uma faísca entre os dois centelhadores, para gerar ondas e assim detectava-as por uma antena ressonante, onde a detecção também era acompanhada de uma faísca entre os eletrodos. Desenvolvendo este experimento, ele observou uma maior dificuldade da faísca de detecção em saltar, quando os eletrodos da antena receptora não estavam expostos à luz, pois entre eles existia um anteparo que a bloqueava. Esta luz era predominantemente violeta e ultravioleta, sendo que a primeira tem frequência visível, e a segunda, além de possuir uma frequência maior, não é observada a olho nu.

Ao comprovar a teoria de Maxwell, uma das mais importantes teorias da física clássica, Hertz estava descobrindo o efeito fotoelétrico, o que mais tarde viria a ser uma das primeiras evidências experimentais da quantização do elétron. Ele verificou que a luz ultravioleta facilitava a descarga devido a sua condição de ejetar elétrons na superfície do eletrodo. Quando estes elétrons eram ejetados sofriam uma aceleração devido à diferença de potencial e faziam com que o ar ficasse ionizado, tornando o meio mais propício à descarga elétrica.



**Figura 2.2:** Sistema de Fotocélula.

O efeito fotoelétrico pode ser observado em um dispositivo chamado de fotocélula, que atualmente tem inúmeras aplicações práticas: controle de portas de elevadores, fotômeros, etc.

No interior de uma ampola de vidro, são colocadas duas placas metálicas X e Y (no vácuo) como mostrado na Figura 2.2. A radiação incide na placa Y. Se houver a emissão de elétrons, estes serão atraídos pela placa positiva “X”, gerando uma corrente elétrica no circuito, que através de um amperímetro sensível (A) poderá ser detectada.

No exemplo do controle de portas, quando uma pessoa aproxima-se, seu corpo interrompe o fluxo de radiação e a corrente se anula, acionando assim o mecanismo que abre a porta.

Após a descoberta deste fenômeno, o físico P. Lenard (1899) realizou investigações que revelaram características estranhas, as quais contradiziam os resultados esperados pela física clássica.

Uma das primeiras experiências foi submeter as partículas originadas da superfície limpa do eletrodo a um campo magnético. Através desse experimento ele descobriu que as partículas emitidas eram os elétrons.

Em suas observações, Lenard percebeu que a intensidade de corrente máxima era proporcional à intensidade de luz, porque o número de elétrons emitidos deveria ser proporcional à energia incidente no cátodo. Esse foi outro fator para o qual ele não encontrou explicação nos patamares clássicos. De acordo com a Física Clássica, esse efeito não deveria depender da frequência de onda. No entanto a experiência mostra que, para cada metal, o efeito só é obtido quando a frequência é maior ou igual a um valor mínimo chamado frequência de corte.

Seguindo a teoria clássica, o tempo necessário para que um elétron adquira energia necessária para escapar é da ordem de horas, dias ou mesmo meses. Sendo que o observado neste experimento é que o tempo entre a emissão da radiação e o momento que esta atinge o eletrodo é extremamente pequeno, da ordem de  $10^{-9}$  s, ou seja, praticamente instantâneo.

Também é notado que a intensidade influi na energia cinética adquirida por cada elétron.

Já em 1905, Einstein retomou a idéia de Lenard e analisando novamente o problema do corpo negro, mostrou que a análise tinha maior coerência quando se admitia que a radiação apresentasse um comportamento como se fosse composta de “pacotes”, onde cada

“pacote” foi chamado de quantum, sendo o seu plural quanta. Posteriormente devido à sugestão do químico americano G. N. Lewis (1875 – 1946) cada quantum recebeu o nome de fóton.

Ainda neste trabalho de 1905, para testar a teoria quântica da radiação, Einstein explicou o efeito fotoelétrico. Foi proposto que o efeito baseava-se numa extensão muito mais audaciosa das idéias de Planck sobre a quantização.

Durante anos o cientista R. A. Milikan não acreditou na explicação de Einstein e para provar que as deduções estavam erradas, passou os 10 anos seguintes realizando pesquisas. No entanto depois de diversas experiências e tentativas, em 1915, Milikan comprovou a veracidade da explicação de Einstein, baseado na sua completa verificação experimental.

Através da hipótese de Einstein, explica-se várias características do efeito fotoelétrico, classicamente inexplicáveis. Por mais intensa que seja, a luz infravermelha não produz efeito fotoelétrico. Por outro lado, a luz ultravioleta de intensidade extremamente fraca produz fotoelétrons em alguns nanossegundos depois de incidir sobre um material quando, segundo a Física Clássica, levaria muito mais tempo para transmitir a energia suficiente a um fotoelétron.

A expressão usada por Einstein no título de seu artigo, “Um ponto de vista heurístico”, mostra que para ele a equação do efeito fotoelétrico não demonstra a existência de fótons: apenas pode ser interpretada desta forma.

## 2.4 O Espectro Atômico

No final do século XIX, a radiação característica emitida pelos átomos dos elementos ao serem aquecidos em uma chama ou submetidos a descargas elétricas foi estudado exaustivamente. Esta radiação aparece como uma série de linhas de várias cores ou comprimento de onda, quando observadas através de um espectroscópio; as porções e intensidades dessas linhas são características de cada elemento.

Os cientistas dedicaram muito tempo e esforço à tarefa de descobrir e interpretar regularidades nos espectros. Em 1885, deu-se um grande passo nesse sentido. Johann

Balmer<sup>1</sup> descobriu que as linhas do espectro de hidrogênio nas regiões da luz visível e do ultra violeta podiam ser calculadas apenas por uma fórmula empírica indicada pela equação 2.2, mas de grande precisão:

$$\lambda_n = C \left( \frac{n^2}{n^2 - 4} \right), \text{ onde } (n=3,4,5,\dots) \quad (2.2)$$

e  $C = 3656,6\text{Å}$ , valor dado por Balmer para constante.

Balmer acreditava que a sua fórmula fosse um caso especial de um caso mais especial que poderia ser usada para prever os espectros de outros elementos. Uma expressão deste último tipo foi descoberta por J. R. Rydberg e W. Ritz, e é por isso chamada de fórmula de Rydberg-Ritz indicada pela Equação 2.2. De acordo com essa expressão, o recíproco com comprimento de onda é dado por

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ para } n > m \quad (2.3)$$

onde m e n são números inteiros e R, a constante de Rydberg, a qual varia ligeiramente de elemento para elemento.

Essas expressões empíricas foram usadas para prever linhas que ainda não tinham sido observadas, como as linhas do átomo hidrogênio fora do espectro visível.

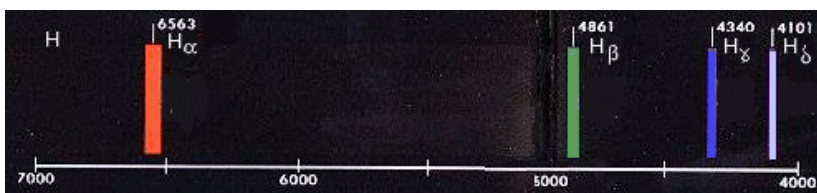


Figura 2.3: Espectro do Hidrogênio

O espectro de hidrogênio é relativamente simples, pois ele contém apenas 1 elétron e é o átomo mais simples que existe. Percebe-se na Figura 2.3 acima representa a parte do espectro de H que cai aproximadamente dentro do intervalo de comprimento da onda da luz visível. O comprimento da onda  $\lambda$  das linhas é medido em unidade de 1 Angstrom ( $\text{Å} = 10^{-8} \text{ cm}$ ); a unidade recebe o nome do físico responsável por algumas das medidas espectroscópicas precisas. Percebe-se que o espaçamento entre a linha adjacente do espectro decresce continuamente à medida que o comprimento de onda das linhas decresce, de modo que a série de linhas converge para o chamado limite da série que

<sup>1</sup> Johann Jakob Balmer (1825-1898), matemático e físico suíço, trabalhou durante a sua vida profissional como professor de matemática de uma escola secundária em Basileia.

corresponde a  $3645,6 \text{ \AA}$ . As linhas com comprimentos de onda pequenos, incluindo o limite da série, são difíceis de serem observadas através de experimentos, pois possuem um pequeno espaçamento e estão na região do ultra violeta.

Logo, o espectro atômico mostra em suas riscas as radiações que os átomos emitem quando um elétron se movimenta entre as camadas do átomo, absorvendo ou emitindo “pacotes” de energia. A emissão de energia se dá através de emissão de frequências, o conjunto de frequências emitidas é o que chamamos de espectro. Isto evidencia a caracterização de níveis discretos de energia, onde o elétron possa emitir o seu espectro, ou seja, é evidenciada a quantização dos níveis de energia.

Pode-se obter o espectro atômico de um átomo através do uso de um aparelho como mostrado na Figura 2.4. Este aparelho decompõe a radiação emitida por um tubo de hidrogênio em espectros, que se caracterizam por apresentar níveis discretos de energia.

Os resultados obtidos não seriam entendidos ao se utilizar a Física Clássica. O modelo clássico de emissão de luz monocromática era um oscilador de Hertz, que só emite à frequência de oscilação  $\nu$ . Não há nada que pareça com o princípio de combinação de Rydberg-Ritz, nem às séries espectrais, como as do hidrogênio.

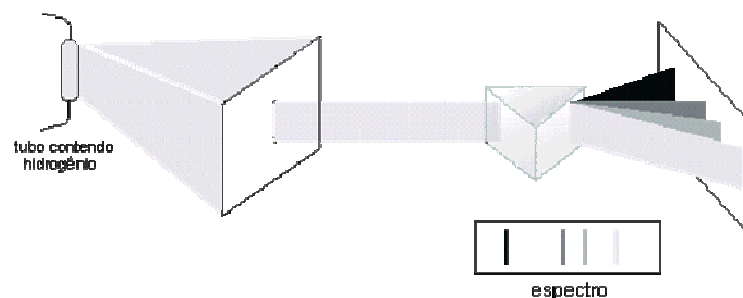


Figura 2.4: Aparelho usado para medir o espectro atômico.

## 2.5 Dualidade Onda-Partícula

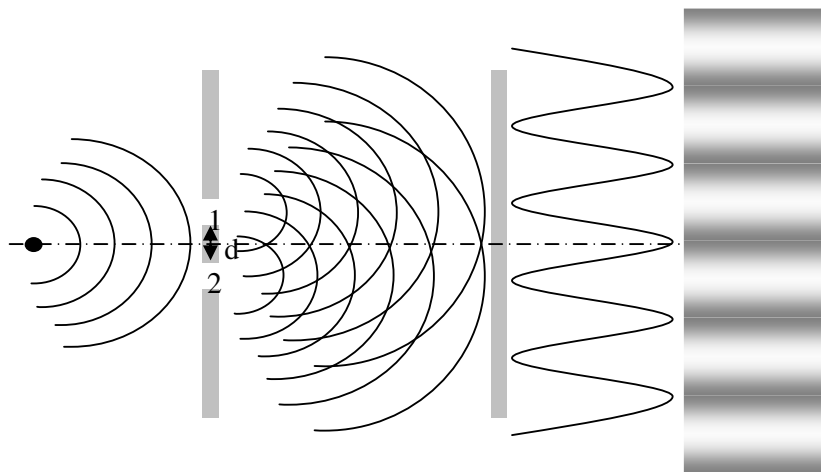
O fenômeno físico que explicita mais claramente a diferença entre ondas e partículas é a interferência. Um dos primeiros cientistas a propor a utilização da ocorrência de interferência para identificar um fenômeno como ondulatório foi Thomas Young ainda no século XIX, no contexto da discussão sobre a natureza da luz. A forma mais simples do experimento de Young consiste na iluminação de duas fendas muito finas, separadas por

uma distância  $d$ ; se a luz for uma onda, a intensidade luminosa no anteparo colocado diante das fendas apresentará oscilações devido à interferência entre as ondas que atravessam as duas fendas. Se a luz for composta por partículas, a intensidade observada será caracterizada por uma distribuição que varia monotonicamente, concentrada na região diretamente frontal às fendas conforme ilustrado na Figura 2.5. Os resultados obtidos por Young (e muitos outros depois dele, em experimentos muito mais sofisticados) demonstram claramente que a luz propaga-se como uma onda.

O experimento original de Young, entretanto, ignora um aspecto fundamental do comportamento da luz, que só foi revelado muito recentemente (no início do século XX). Se a luz fosse uma onda clássica, uma redução da intensidade luminosa ocasionaria apenas uma redução na intensidade global do padrão de interferências, que continuaria aparecendo como uma distribuição contínua de energia. O que se observa, entretanto, é que, quando a intensidade do feixe luminoso é muito baixa, ao invés de uma distribuição contínua de energia, tem-se uma seqüência de “impactos” em posições aleatórias na tela. O acúmulo destes impactos acaba por formar o padrão de interferência tradicional.

Este resultado, entretanto, muda completamente nossa concepção sobre a luz. Ela comporta-se como uma onda quando se propaga, mas comporta-se como partícula ao trocar energia! Uma das primeiras evidências experimentais deste comportamento é o efeito fotoelétrico, discutido na Seção 2.3.

O fato de que a luz comporta-se, às vezes como onda, às vezes como partícula, levou De Broglie a conjecturar que partículas materiais também tivessem comportamento ondulatório. Esta hipótese foi formulada por analogia com o comportamento observado para a luz, sem nenhuma evidência experimental direta. Mais tarde observou-se que feixes



**Figura 2.5:** Experimento de Young para luz.

de elétrons também sofrem difração, e, portanto, propagam-se como ondas.

## 2.6 A Hipótese de De Broglie

A hipótese de de Broglie consiste em supor que a uma partícula livre de massa  $m$  está associada uma onda plana definida pela Equação 2.4.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(kx - \omega t)} \quad (2.4)$$

onde  $k = \frac{p}{\hbar}$  e  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ ,  $N$  a constante de normalização,  $p$  é o momento linear da partícula e  $E$  é a energia mecânica da partícula (2.5); como a partícula é livre,

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.5)$$

Esta hipótese foi verificada experimentalmente inúmeras vezes, para vários tipos diferentes de partículas.

Entretanto, a formulação de uma teoria quântica geral exigia uma prescrição para determinar a função de onda de uma partícula sujeita a uma energia potencial qualquer,  $V(x)$ . Esta prescrição foi proposta por Schrödinger em 1925.

## 2.7 A Equação de Schrödinger

No final de 1925, Schrödinger propôs a equação de onda que governa o movimento de elétrons e outras partículas com massa de repouso diferente de zero, que é análoga à equação de onda clássica. Atualmente esta equação recebe o nome de seu criador, equação de Schrödinger definida na Equação 2.6.

Esta equação, assim como a equação de onda clássica, relaciona as derivadas da função de onda em relação ao tempo e em relação ao espaço. Ela não pode ser demonstrada, mas sua validade está em concordância com os resultados experimentais.

A equação de Schrödinger para uma partícula de massa  $m$  em uma dimensão, tem a seguinte forma:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (2.6)$$

Esta equação é satisfeita por uma função de onda harmônica no caso especial de uma partícula livre, ou seja, sobre a qual não age nenhuma força e para a qual, portanto, a energia potencial é constante:  $V(x,t) = V_0$ . Portanto, a hipótese de de Broglie é um caso especial da equação de Schrödinger.

Uma função da forma  $\cos(kx - \omega t)$  não satisfaz esta equação, porque a diferenciação em relação ao tempo transforma o co-seno em seno, mas a segunda derivada em relação a  $x$  produz um co-seno. Através de um raciocínio semelhante, verifica-se que a função  $\sin(kx - \omega t)$  também não pode ser uma solução. Entretanto, a fórmula exponencial da função de onda harmônica, Equação 2.7, satisfaz a equação. Considere a função:

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)} = A [\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] \quad (2.7)$$

onde  $A$  é uma constante. Nesse caso,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega A e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = (ik)^2 A e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \Psi \quad (2.9)$$

Substituindo estas derivadas, Equações 2.8 e 2.9, na equação de Schrödinger e fazendo  $V(x,t) = V_0$ , temos a Equação 2.10.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 \Psi) + \Psi V_0 = i\hbar (-i\omega) \Psi \quad (2.10)$$

ou

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar \omega$$

A equação de Schrödinger difere da equação de onda clássica, principalmente devido ao fato de o número imaginário  $i = \sqrt{-1}$  aparecer explicitamente. As funções de onda que satisfazem a equação não são necessariamente reais. Isto é, a função de onda  $\Psi(x,t)$  que satisfaz a equação não é uma função diretamente mensurável, como a função de onda clássica  $y(x,t)$ , já que os resultados das medições são necessariamente números reais.

A interpretação probabilística da função de onda foi proposta por Max Born, que é reconhecida como a forma mais apropriada de relacionar as soluções da equação de

Schrödinger aos resultados de medições. A probabilidade de um elétron estar no intervalo  $dx$ , um número real, pode ser medida verificando a fração do tempo em que a partícula é encontrada nesta região, para uma série muito grande de situações idênticas. De acordo com a interpretação de Born tem-se que a Equação 2.11:

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (2.11)$$

onde  $\Psi^*$ , o complexo conjugado de  $\Psi$ , é obtido substituindo  $i$  por  $-i$  na função de onda [Tipler]. A função de onda não passa de um artifício matemático, o que tem significado real é o produto  $\Psi\Psi^* = |\Psi|^2$ , que representa uma densidade de probabilidade  $P(x,t)$ . Às vezes  $\Psi(x,t)$  é chamada de amplitude de densidade de probabilidade, ou simplesmente amplitude de probabilidade para manter analogia com as ondas e funções de ondas clássicas.

A probabilidade de um elétron ser encontrado no intervalo entre  $x_1$  e  $x_1 + \Delta x$ , ou no intervalo  $x_2$  e  $x_2 + \Delta x$ , é a soma das probabilidades individuais,  $P(x_1)dx + P(x_2)dx$ . Como o elétron tem que estar necessariamente em algum ponto do espaço, a soma das probabilidades para todos os valores possíveis de  $x$  deve ser igual a 1 como indica a Equação 2.12 [French].

Tem-se então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (2.12)$$

Essa equação é conhecida como condição de normalização. Esta condição desempenha um papel importante na mecânica quântica, pois impõe uma restrição adicional às possíveis soluções de Schrödinger. No caso particular analisado, a condição de normalização significa que a função de onda  $\Psi(x,t)$  deve tender a zero com rapidez suficiente para que a integral da equação permaneça finita quando  $x \rightarrow \pm\infty$ . [TIPLER]

## 2.7.1 Equação de Schrödinger: Separação de Variáveis

Em problemas onde a energia potencial não varia com o tempo, as funções do tempo e do espaço da equação de Schrödinger podem ser separadas.

O método de separação de variáveis consiste em supor que a solução pode ser escrita como produto de duas funções, uma apenas do tempo e a outra apenas do espaço:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$$

Para realizar a transformação, a energia potencial não pode depender explicitamente do tempo.

Substituindo  $\Psi(x,t)$  na equação de Schrödinger temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(t)\psi(x) = i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt} \quad (2.13)$$

Nota-se após esta transformação que a equação de Schrödinger torna-se composta por derivadas ordinárias e não parciais.

Agora dividindo a Equação 2.13 por  $\psi(x)\phi(t)$ , tem-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} \quad (2.14)$$

Após a última transformação, nota-se que a equação foi separada em dois termos bem distintos, um dependente apenas do espaço e outro apenas do tempo. Isto significa que variações de  $t$  não podem afetar o valor do lado esquerdo da Equação 2.14 e nem variações de  $x$  podem afetar o lado direito. Logo os dois lados da equação têm que ser iguais a uma constante, que é chamada de  $C$ . Esta recebe o nome de constante de separação. Após esta definição da constante, pode-se separar a equação parcial que passa a conter duas variáveis independentes em duas equações. Com a separação a equação de Schrödinger fica agora dividida em duas equações, uma dependendo do tempo e a outra do espaço.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = C \quad (2.15)$$

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = C \quad (2.16)$$

Como a Equação 2.16 não depende do potencial, as soluções da equação de Schrödinger terão a mesma dependência temporal quando os potenciais não forem funções explícitas do tempo.

Resolvendo a Equação 2.16, tem-se como solução  $\phi(t) = e^{\frac{iCt}{\hbar}}$  para descrever a variação do tempo em  $\Psi(x,t)$ . Segundo De Broglie, a frequência de onda representada por  $\Psi(x,t)$  é  $f = \frac{E}{h}$ . No caso da solução de  $\phi(t)$ , a equação apresenta frequência igual a

$f = \frac{C}{h}$ . Portanto, o único valor admissível para  $C$  é  $E$ , energia total da partícula. Logo, a

solução da equação que descreve a variação do tempo para  $\Psi(x,t)$  torna-se  $\phi(t) = e^{\frac{iEt}{\hbar}}$ .

Como já encontramos o valor de  $C$ , substituindo-o na Equação 2.16 tem-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = E \quad (2.17)$$

Multiplicando ambos os lados por  $\psi(x)$  encontramos a equação de Schrödinger independente do tempo, Equação 2.17, que tem a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.18)$$

Para que uma função de onda satisfaça a Equação 2.18, esta deve apresentar algumas propriedades matemáticas, são elas:

- $\psi(x)$  e  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  devem existir e serem contínuas;
- $\psi(x)$  e  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  devem ser unívocas;
- $\psi(x)$  deve tender a zero com suficiente rapidez, quando  $x \rightarrow \pm\infty$ , para que a integral de normalização seja finita.

## 2.7.2 Princípio da Superposição

Como consequência da linearidade da equação de Schrödinger, duas ou mais funções de onda, que são soluções da equação, quando combinadas formam uma nova função de onda, que também é solução da equação de Schrödinger.

Seja a equação de Schrödinger definida na Equação 2.19.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad (2.19)$$

Suponha que existam duas equações  $\Psi_I(x,t)$  e  $\Psi_{II}(x,t)$ , que sejam funções de onda e soluções da equação de Schrödinger. Logo, por consequência da sua linearidade tem-se a Equação 2.20.

$$\Psi_{III}(x,t) = c_I\Psi_I(x,t) + c_{II}\Psi_{II}(x,t) \quad (2.20)$$

onde as constantes  $c_I$  e  $c_{II}$  são constantes complexas quaisquer. Logo,  $\Psi_{III}(x,t)$  é uma solução para a equação de Schrödinger.

Outra consequência da linearidade está relacionada com a normalização da função de onda. Quando uma função de onda é solução da equação, mesmo multiplicada por uma constante complexa, continua sendo solução da equação, em decorrência, temos que sempre é possível obter a Equação 2.21.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (2.21)$$

multiplicando-se  $\Psi$  por uma constante apropriada.

A interpretação probabilística diz que o módulo ao quadrado da função de onda fornece a densidade de probabilidade, ou seja, fornece a probabilidade de se encontrar a partícula em num intervalo  $dx$ , em torno da coordenada  $x$ , no instante  $t$ . Sendo assim, a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer ponto do espaço, expressa pela integral acima, tem que ser um.

## 2.8 Composição da Matéria

### 2.8.1 Átomo

Quando os primeiros filósofos gregos se deram conta da enorme variedade de matéria existente à sua volta, suspeitaram que deveriam haver alguns materiais básicos que originariam toda essa variedade. Eles estavam certos. Embora Demócrito (460-370 a.C e Leucipo (c.V a.C) já comesassem a usar o termo átomo<sup>2</sup>, somente muitos anos depois, durante o século XIX, transformou-se em convicção a idéia de que toda a matéria existente é formada de átomos.

Os números de tipos de átomos conhecidos – aproximadamente cem – começou, porém a ficar grande. Mais uma vez suspeitou-se de que esses átomos poderiam ser compostos de partículas mais simples. Com isso descobriu-se que os átomos são feitos de três tipos de partículas: o próton (p+), o elétron (e-) e o nêutron (n). Na parte central do átomo, chamado núcleo, ficam os prótons (carga positiva) e os nêutrons (cargas neutras)

---

<sup>2</sup> palavra grega que significa indivisível pois na época de sua idealização, imaginava-se ser a menor partícula possível de matéria(a = não, tomos = parte)

chamados genericamente de núcleos. Os elétrons (cargas negativas) ficam em torno do núcleo, constituindo a eletrosfera, pois são atraídos pela carga positiva dos prótons. O total de elétrons em cada átomo eletricamente neutro é igual ao número de prótons. O número de prótons é chamado de número atômico ( $Z$ ) e o total de prótons e nêutrons é chamado de número de massa ( $A$ ).

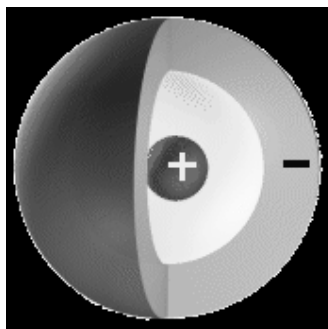
Os prótons e nêutrons não ficam em repouso dentro do núcleo. Eles ficam em constante vibração, de modo semelhante ao que acontece com a agitação térmica dos átomos e moléculas de um corpo macroscópico. Normalmente o núcleo está no nível de energia mais baixo (estado fundamental). Porém a vibração interna irá aumentar se, de algum modo, o núcleo ganhar energia; dizemos, então, que o núcleo está num estado excitado. Isso pode acontecer, por exemplo como resultado de uma colisão ou absorção de um ou mais fótons. A tendência é o núcleo voltar ao seu estado fundamental, devolvendo essa energia adicional ou expulsando uma ou mais partículas do seu interior.

## 2.8.2 Estrutura da Matéria

Apesar dos elétrons e prótons possuírem a mesma carga, não apresentam a mesma massa. O próton é 1836,11 vezes mais maciço que o elétron.

Considerando-se um átomo com a carga elétrica em perfeito equilíbrio dinâmico, ou seja, número de prótons igual ao número de neutros igual ao de elétrons, nota-se que 99,97% de sua massa encontra-se no núcleo. Isso significa que a densidade do núcleo é extremamente grande, enquanto a da eletrosfera é extremamente pequena como nmostrado na Figura 2.6.

Apesar do núcleo conter praticamente toda massa, seu volume em relação ao tamanho do átomo e de seus orbitais é minúsculo. O núcleo atômico mede em torno de  $10^{-14}$  m de diâmetro, enquanto que o átomo mede cerca de  $10^{-10}$  m. Portanto, pode-se concluir que o átomo é 10.000 vezes maior que o seu núcleo.



**Figura 2.6:** Representação esquemática de um átomo.

Dados referentes aos elétrons:

- Carga elétrica:  $1,60218 \times 10^{-19} \text{C}$
- Massa:  $9,10953 \times 10^{-31} \text{Kg}$

### **2.8.3 Modelo da Mecânica Quântica ou Mecânica Ondulatória para o Átomo (1924-1927)**

Pelo modelo atômico atual, chamado modelo da mecânica quântica, não se admite mais a existência de órbitas, nem circulares e nem elípticas para os elétrons. O que existe são regiões de máxima probabilidade de se encontrar o elétron no seu movimento ao redor do núcleo.

Esse modelo foi criado entre 1924 e 1927, principalmente por De Broglie, Heisenberg e Schrödinger.

Como vimos anteriormente, Louis De Broglie, em 1924, propôs o modelo de partícula-onda para o elétron, pois alguns fatos experimentais mostravam que o elétron era uma partícula e outros, que ele era uma onda. Na realidade, o elétron apresenta característica de partícula e de onda.

Já em 1926, Heisenberg enunciou o Princípio da Incerteza, no qual afirmava: “é impossível determinar simultaneamente a posição e a velocidade de um elétron no átomo”.

Portanto tendo em vista o Princípio da Incerteza é errado falar em posição do elétron no átomo. O que a mecânica quântica pode determinar é a região de máxima probabilidade onde está o elétron, região essa denominada orbital.

A Equação para a Função de Onda ( $\Psi$ ) além de descrever o movimento do elétron ao redor do núcleo também determina matematicamente a região de máxima probabilidade de se encontrar o elétron. Essa equação foi deduzida por Schrödinger, em 1927.

## 2.8.4 Princípio da Incerteza de Heisenberg

De acordo com o Princípio da Incerteza, indicado na Equação 2.22.

$$(\Delta x)(\Delta Q) \geq h \quad (2.22)$$

Onde  $(\Delta x)$  indica a incerteza na medida da posição e  $(\Delta Q)$  a incerteza na medida da quantidade de movimento. Então isso significa que obtendo uma grande precisão no valor da posição, encontra-se uma pequena precisão no valor da quantidade de movimento, e vice-versa.

Há também um Princípio de Incerteza relacionando a energia ( $E$ ) de um partícula, medida de num intervalo de tempo  $\Delta t$  indicado na Equação 2.23.

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq h \quad (2.23)$$

O Princípio da Incerteza tem um outro aspecto mais profundo. Mesmo que não esteja se fazendo nenhuma medida, o Princípio da Incerteza proíbe que uma partícula tenha posição e quantidade de movimento bem definidos simultaneamente. Como exemplo, é analisada a questão de Zero Absoluto, que seria a temperatura em que as moléculas do corpo estariam em repouso. Mas, se isso ocorresse, cada molécula teria posição e quantidade de movimento bem definidos, o que é proibido pelo Princípio da Incerteza. Portanto, as moléculas do corpo nunca ficarão totalmente imóveis.

## 2.8.5 Moléculas

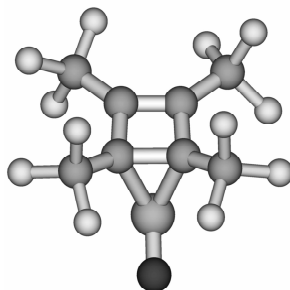


Figura 2.7: Modelo de molécula.



Um conjunto de dois ou mais átomos unidos por pares compartilhados de elétrons forma uma molécula como mostra a Figura 2.7. A ligação entre estes átomos é chamada de covalente, que é uma ligação de compartilhamento de elétrons entre os átomos.

A natureza das moléculas determina as propriedades químicas das substâncias e depende da relação de proporção entre os átomos que as integram e do arranjo desses átomos dentro das moléculas. Como consequência as substâncias se caracterizam pela natureza dos átomos que as compõem.

## 2.8.6 Sólidos

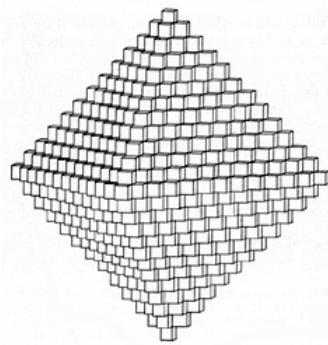
As origens das propriedades dos sólidos só se tornaram conhecidas há menos de um século, com o aparecimento da mecânica quântica. Grande parte do progresso tecnológico ocorrido no século XX resulta da aplicação da mecânica quântica ao estudo dos sólidos.

A matéria é encontrada em três formas: sólida, líquida e gasosa. Nos gases as partículas que compõe a substância (átomo ou moléculas) estão a uma distância média muito maior que o tamanho das partículas, ou seja, as partículas ficam muito distantes uma das outras. Em consequência, a força de ligação entre as partículas de um gás é muito pequena, o que justifica o fato de o gás apresentar a forma e o volume do recipiente que o contém. Elas praticamente não interagem, a não ser através das colisões freqüentes, mas de curta duração. Nos líquidos e sólidos, as partículas estão muito mais próximas e interagem com uma força comparável à que mantêm os átomos unidos nas moléculas. Nos líquidos a força de ligação é suficiente para manter o volume definido, mas insuficiente para manter a forma. Por isso, o líquido adquire a forma do recipiente que o contém. Nos líquidos, as partículas formam ligações temporárias de curto alcance que são constantemente rompidas e refletidas em consequência da agitação térmica. A força dessas ligações depende do tipo de partícula. Já nos sólidos, a força de ligação é muito intensa, o que justifica o fato de apresentarem forma e volume definidos. Existe uma quarta forma de matéria, o plasma, que como as outras formas é formada por íons e elétrons livres. Os plasmas são gerados apenas em temperaturas muito elevadas, como no interior das estrelas ou quando os gases são submetidos a fortes descargas elétricas, como relâmpago e em certas experiências de laboratório.

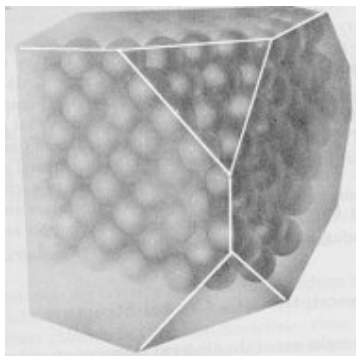
Quando um líquido é resfriado lentamente, a energia cinética das partículas que o compõe diminui e as partículas passam a formar um arranjo regular que maximiza o

número de ligações e minimiza a energia potencial. Caso, porém, o líquido seja resfriado tão depressa que as partículas se imobilizem antes que tenham tempo de encontrar as posições de energia mínima, o sólido assim formado não apresenta uma estrutura cristalina, mas se parece com um líquido “congelado”. Um sólido deste tipo é chamado de amorfo. Os sólidos amorfos apresentam ordem de curto alcance, mas não a ordem de longo alcance (que se estende por muitos diâmetros atômicos) que caracteriza um cristal. O vidro é um exemplo típico de sólido amorfo. Enquanto os cristais apresentam um ponto de fusão bem definido, os sólidos amorfos se tornam simplesmente mais deformáveis com o aumento da temperatura. Muitas matérias podem se solidificar no estado amorfo ou no estado cristalino, dependendo da forma como são preparados; outros em apenas uma dessas formas. A maioria dos sólidos existe naturalmente na forma de policristais, isto é, um conjunto de pequenos monocristais ( com uma fração de milímetro de diâmetro) orientados em diferentes direções como mostra as Figuras 2.8 e 2.9. Entretanto, grandes monocristais são encontrados e produzidos artificialmente [TIPLER].

A regularidade da estrutura de um monocristal é a sua propriedade mais importante. Ela pode ser considerada como um arranjo básico relativamente simples, repetido indefinidamente em todas as direções. A menor unidade de um cristal recebe o nome de célula unitária. A simetria dessa célula depende do tipo de ligação entre os átomos, íons ou moléculas que formam o cristal. Quando a célula unitária contém mais de um tipo de átomo, a simetria depende também do tamanho relativo desses átomos. A simetria pode mudar com a pressão e/ou temperatura.[TIPLER]



**Figura 2.8:** Modelo de Simetria de um cristal



**Figura 2.9:** Modelo de Simetria de um cristal

## 2.8.7 Estrutura Cristalina

A física da matéria condensada ou física do estado sólido é uma das aplicações mais importantes da mecânica quântica no estudo da estrutura da matéria. Essa é uma das áreas mais ativas da física atual.

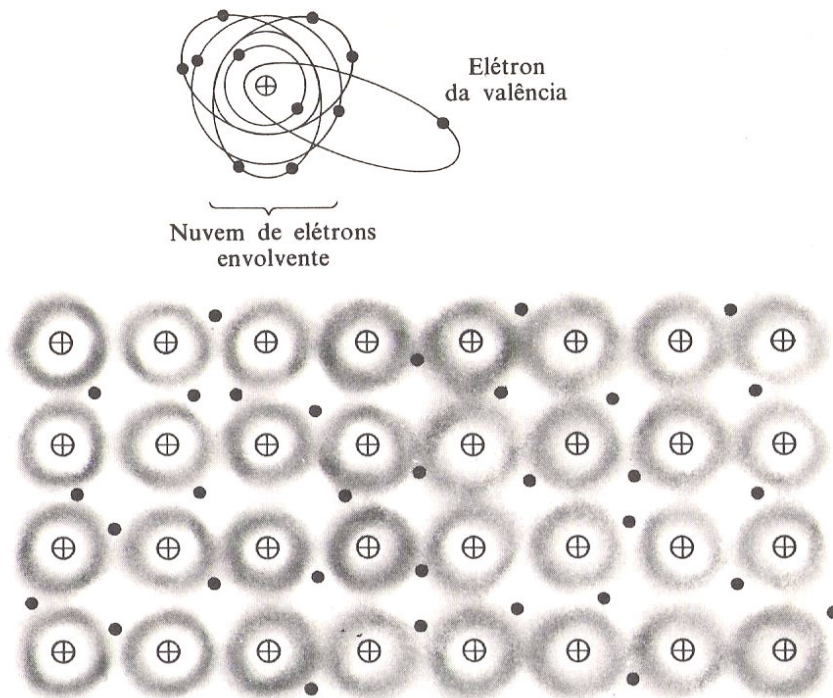
A física do estado sólido trata da matéria agregada especialmente em sua forma cristalina. Um sólido é cristalino se o conhecimento das posições de um número determinado de átomos que constituem o sólido permite a reconstituição das posições dos demais átomos constituintes.

Um cristal é uma rede periódica tridimensional, cujos elementos são átomos ou agrupamentos atômicos.

Para ter noção do comportamento do elétron da valência em um sólido imagine simples átomos de material monovalente colocados juntos. O núcleo, é equilibrado eletricamente por uma nuvem de elétrons que giram em torno dele, em órbitas de vários tamanhos e formatos. Esses elétrons orbitais, com exceção de um, apresentam ligações firmes com núcleo, que possuem órbitas de tamanho reduzido quando comparado com as dimensões do átomo inteiro. Essa é uma nuvem interna de elétrons. Os elétrons de valência são os elétrons da última órbita do átomo, responsáveis pelas propriedades químicas de valência dos materiais e que determinam a maior parte das propriedades físicas, químicas e ópticas da matéria.

Reunindo um grande número de tais átomos e condensando-os numa amostra de material sólido cristalino, os núcleos atômicos irão se dispor em figuras e arranjos tridimensionais, compostos de fileiras, colunas e planos, numa distribuição regular e periódica. Nesse arranjo, mostrado na Figura 2.10, as órbitas dos elétrons de valência

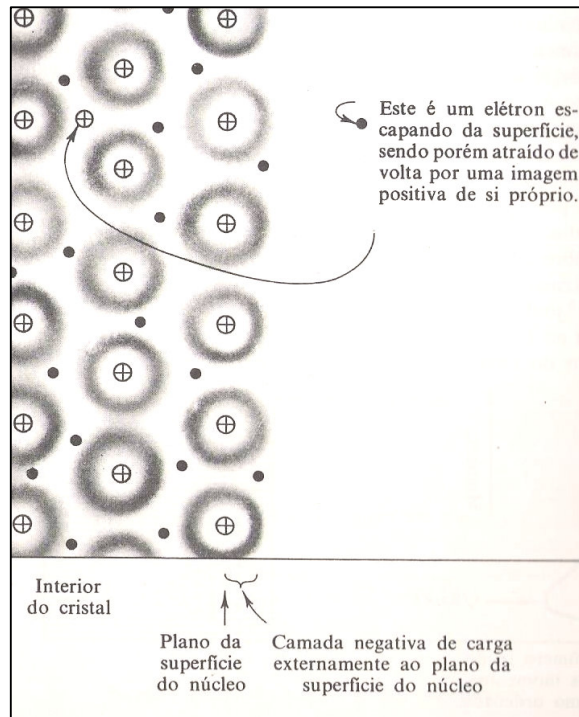
pertencentes a átomos vizinhos irão interpenetrar uma na outra, tornando-se impossível a descoberta dos átomos de origem destes elétrons. De fato, os elétrons da valência em metais sólidos não podem ser considerados como pertencentes a qualquer átomo particular. Quando os elétrons de valência são separados do seu átomo original eles estão livres para se deslocarem através do cristal, assim como as moléculas livres de um gás voando nos espaços vazios internos de um envoltório determinado e que vem preenchido com corpos maiores, por exemplo, partículas semelhantes a bolas de ping-pong. O que mantém o arranjo cristalino dos núcleos atômicos com carga positiva mais unido é a ação das forças eletrostáticas resultantes junto com a nuvem de elétrons de valência que se desloca na estrutura. Para esse tipo de coesão cristalina aplica-se o termo ligação metálica.



**Figura 2.10:** Parte superior: ilustração de um modelo clássico de um átomo, os pontos individuais representam elétrons, enquanto que os traços indicam as órbitas. Parte inferior: nuvem de elétrons vem indicada pelo anel sombreado. Os pontos representam os elétrons[SHIVE].

Naquilo que se aplica a um elétron de valência individual, a parte interna de uma porção sólida de metal se aproxima bastante do comportamento do interior de uma caixa de potencial, com as dimensões e formato da amostra. Realmente, a parte interna desse envoltório em forma de caixa é terrivelmente desordenada devido à presença de outros núcleos e outros elétrons. Entretanto, lembrando que os diâmetros dos elétrons e dos

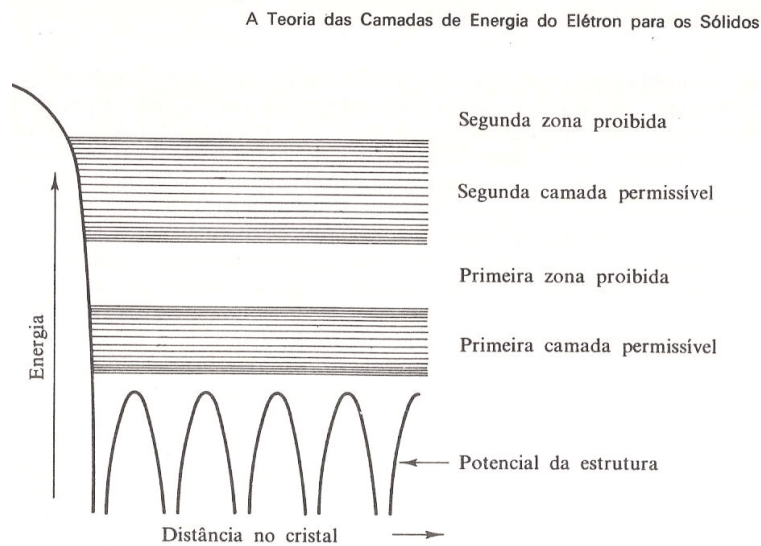
núcleos atômicos são da ordem de  $10^{-15}$  m, enquanto o diâmetro da órbita de um elétron do átomo de sódio é da ordem de  $10^{-10}$  m, resulta que a parte interna desse corpo metálico tem mais de 99,9% do seu espaço vazio. Assim, a dificuldade oferecida pelo material ao movimento livre dos elétrons da valência é muito pequena; pode-se inclusive desprezá-la [Shive].



**Figura 2.11:** Um elétron de valência não pode normalmente escapar no interior do sólido [SHIVE].

Em temperaturas normais, esses elétrons de valências são realmente confinados, como numa caixa. O elétron analisado não pode-se deslocar pela superfície externa da amostra de sódio, no caso [SHIVE]. Esse confinamento é apresentado por duas razões. Primeiramente, a nuvem de elétrons com carga negativa localiza-se do lado externo do plano formado pelos núcleos na camada externa dos átomos, junto à face externa da amostra considerada, o que é representado na Figura 2.11. Na escala atômica, o plano superficial do núcleo positivo e a camada de partículas com cargas negativas apresentam certo grau de granulosidade, mas em conjunto atuam como um par de grades com carga, evitando que os elétrons de valência tenham facilidade de escapar. Em segundo lugar, analisa-se a possibilidade de um elétron de valência conseguir penetrar nessa “barreira”. Se isso acontecer a porção ficará com carga positiva e atrairá o elétron de volta para tentar restaurar a estabilidade. O que evita a fuga dos elétrons da valência pela superfícies são os

obstáculos, de origem eletrostática, que mantêm a nuvem desses elétrons na parte interna do sólido. Os elétrons da valência só são capazes de escapar do corpo se receberem quantidades de energia fora das normais. Isso acontece, por exemplo, se houver uma elevação de temperatura, nesse caso fala-se que o elétron escapou por emissão termiônica. Mas as radiações luminosas também podem dar origem a fuga de elétrons, sendo que nesse caso a fuga é por fotemissão. E assim outras formas de energia também podem motivar deslocamentos equivalentes.



**Figura 2.12:** Diagrama de energia de um elétron de valência de um sólido se apresenta como na figura [SHIVE].

Nesse diagrama da Figura 2.12, as energias são inscritas como função da localização dentro do cristal. Essas energias presentes são agrupadas em bandas ou camadas, sendo que, as camadas estão separadas por intervalos (gap<sup>3</sup>) de energia.

Em cristal típico, as camadas de energia têm espessuras de alguns elétron-volts e os intervalos proibidos ou camadas proibidas com espessuras de zero a alguns elétron-volts [Shive]. Em um cristal metálico do tamanho de um cubo de açúcar existem cerca de  $10^{22}$  átomos. Assim cada camada conterà  $10^{22}$  níveis de energia eletrônica permissíveis, que estarão espaçados entre si de  $\sim 10^{-21}$  a  $10^{-20}$  elétron-volts, dentro das camadas. Considerando-se, no caso, um cristal maior ele terá maior número de energia, porém menos afastados entre si.

<sup>3</sup> Do inglês gap = intervalo

As energias dos limites superior e inferior das camadas são determinadas pela natureza do material e de seus parâmetros cristalinos, e não pelo tamanho do corpo. Este só determina o número e a separação dos diversos níveis de energia dentro das camadas ou bandas. A quantidade de níveis dentro de cada corpo depende dos átomos do corpo.

## 3 MODELOS SIMPLIFICADOS PARA SISTEMA DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

Sistemas de baixa dimensionalidade são aqueles nos quais os elétrons estão confinados em uma ou mais dimensões, ficando livres para se mover em duas dimensões ou mais. Quando falamos de confinamento estamos nos referindo ao “aprisionamento” do elétron numa região pequena comparada com seu comprimento de onda típico e com as outras dimensões do sistema. Por exemplo, um sistema cujas dimensões nas direções  $x$  e  $y$  sejam da ordem de alguns ângstrons ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) e na direção  $z$  seja de algumas de centenas de nanômetros é um exemplo do que chamamos de fio quântico, e é um sistema quase unidimensional. Para descrever o movimento eletrônico neste sistema podemos supor, sem errar muito, que ele move-se apenas ao longo da direção  $z$ . Precisamos, portanto, resolver apenas a equação de Schrödinger unidimensional, muito mais simples do que sua versão tridimensional.

A variação da energia potencial do elétron ao longo da direção  $z$  está associada à composição do sistema, ou seja, ao tipo de átomo presente no fio quântico. A interação entre um elétron e os átomos que compõe o material é relativamente complicada, mas pode ser substituída, em uma primeira aproximação, por um potencial efetivo constante, diferente para cada tipo de átomo. Assim, o modelo mais simples possível para o comportamento de um elétron em um fio quântico corresponde a um potencial unidimensional constante por partes. A seguir apresentamos alguns exemplos específicos de potenciais e os sistemas físicos que eles descrevem aproximadamente.

### 3.1 Barreira de Potencial Retangular

Imagine um fio quântico formado por uma seqüência semi-infinita de átomos do tipo A interrompida por  $N$  átomos do tipo B, seguida por outra seqüência infinita de átomos do tipo A, conforme ilustra a Figura 3.1.

Se associamos aos átomos A o potencial  $V_A$  e aos B o potencial  $V_B$ , o perfil de potencial deste sistema é descrito pela função cujo gráfico está mostrado na Figura 3.1. De

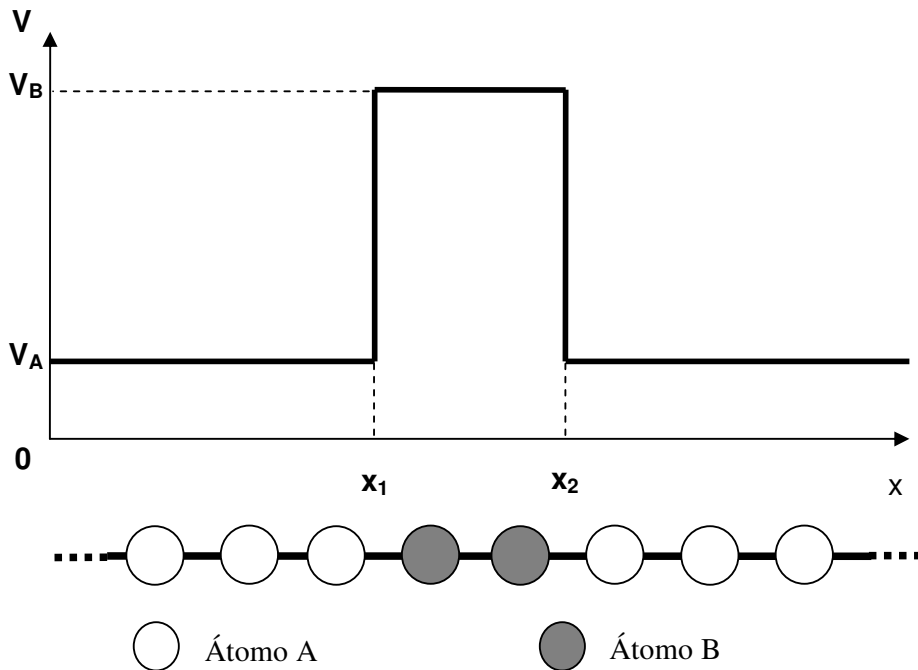


acordo com o nosso modelo, o potencial associado a este sistema é descontínuo em dois pontos. Em sistemas físicos reais não há potenciais descontínuos; a descontinuidade do nosso modelo representa uma variação abrupta da energia potencial, uma variação que ocorre num intervalo muito menor que o comprimento de onda eletrônico típico. A opção de introduzir a descontinuidade nos modelos deve-se à simplificação matemática obtida com a substituição da variação abrupta contínua pela descontinuidade.

O potencial deste sistema pode ser descrito matematicamente na forma:

$$V(x) = V_a \text{ para } x < x_1 \text{ e } x > x_2$$

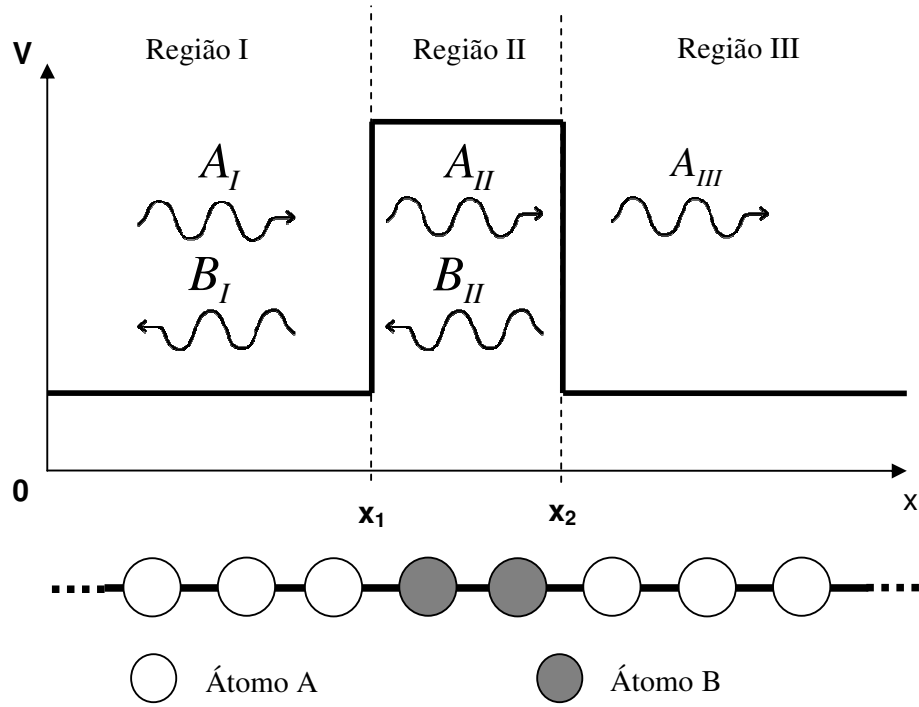
$$V(x) = V_b \text{ para } x_1 < x < x_2$$



**Figura 3.1:** Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial  $V_A$  é menor que o potencial  $V_B$ .

Uma partícula clássica sujeita a este potencial sofre a ação de uma força impulsiva para a esquerda na primeira descontinuidade. Se sua energia cinética for maior que a energia potencial na região II ela continua propagando-se nesta região com uma velocidade  $v_{II} < v_I$ . Ao atingir a segunda descontinuidade ela sofre uma força impulsiva para a direita, e entra na região III, com sua velocidade original  $v_I$ . Se a energia cinética da partícula for menor que a altura da barreira, a força impulsiva na primeira descontinuidade faz com que a velocidade da partícula mude de sinal, e ela passa a se mover para a esquerda. O comportamento de partícula é deterministicamente definido pela relação entre sua energia

total e a altura da barreira. Uma partícula quântica, entretanto comporta-se de maneira bastante distinta como vemos a seguir como mostra a Figura 3.2.



**Figura 3.2:** Equações de onda definidas por regiões de uma barreira de potencial retangular.

Segundo a equação de Schrödinger, as funções de onda para cada região, quando a energia do elétron é  $E$ , são:

Região I:

$$\psi_I = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \quad (3.1)$$

Região II:

$$\psi_{II} = A_{II} e^{-\alpha x} + B_{II} e^{\alpha x} \quad (3.2)$$

Região III:

$$\psi_{III} = A_{III} e^{ik_{III} x} \quad (3.3)$$

onde :

$$k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m((V_B - V_A) - E)}{\hbar^2}}$$

É importante ressaltar que cada  $\psi$  é composto por uma porção de onda que caminha, uma para a direita, e a outra para a esquerda, nas regiões I e II como demonstrado pelas Equações 3.1 e 3.2. Nota-se que na região III é apresentada apenas a porção de onda que caminha para a direita, Equação 3.3, pois supôs-se que o elétron incide na barreira da esquerda para a direita, e não há nenhum processo físico que possa fazer com que a partícula tenha velocidade negativa na região III.

Conforme mencionado no capítulo anterior, para que a função de onda obedeça a equação de Schrödinger, independente do tempo, a própria função e sua derivada devem ser contínuas em todos os pontos do espaço, inclusive nos pontos de descontinuidade do potencial. Sendo assim impomos as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1) &= \psi_{II}(x_1) & \psi_{II}(x_2) &= \psi_{III}(x_2) \\ \psi'_I(x_1) &= \psi'_{II}(x_1) & \psi'_{II}(x_2) &= \psi'_{III}(x_2) \end{aligned}$$

que fornecem quatro equações algébricas. Precisamos a princípio determinar 5 coeficientes  $A_I$ ,  $B_I$ ,  $A_{II}$ ,  $B_{II}$  e  $B_{III}$ . Note, entretanto, que  $A_I$  representa a probabilidade de encontrar um elétron na região I incidindo sobre a barreira. Como podemos controlar a incidência de elétrons sobre a barreira tomamos  $A_I = 1$ , ou seja, estamos estudando a situação em que temos certeza em que um elétron incidiu sobre a barreira.

É válido lembrar que a diferença  $x_2 - x_1$  fornece a largura da barreira, valor este que determina vários aspectos do comportamento do elétron no sistema em questão.

Agora o sistema a ser resolvido é composto por 4 equações:

$$\begin{cases} e^{iK_I x_1} + B_I e^{-iK_I x_1} = A_{II} e^{-\alpha x_1} + B_{II} e^{\alpha x_1} \\ ik_I (e^{iK_I x_1} - B_I e^{-iK_I x_1}) = \alpha (-A_{II} e^{-\alpha x_1} + B_{II} e^{\alpha x_1}) \\ A_{II} e^{-\alpha x_2} + B_{II} e^{\alpha x_2} = A_{III} e^{iK_I x_2} \\ \alpha (-A_{II} e^{-\alpha x_2} + B_{II} e^{\alpha x_2}) = ik_I A_{III} e^{iK_I x_2} \end{cases}$$

Com a solução do sistema, pode-se calcular o valor dos coeficientes de transmissão e de reflexão. Estes coeficientes são definidos de forma a fornecer as probabilidades de reflexão e transmissão de um elétron que atinge a barreira.

$$t = \frac{k_{III} A_{III}}{k_I A_I} \quad (3.4)$$

$$r = \frac{k_I B_I}{k_I A_I} \quad (3.5)$$

Os coeficientes de transmissão, Equação 3.4, e reflexão, Equação 3.5, são quantidades complexas e os seus módulos ao quadrado fornecem a probabilidade de transmissão  $T = |t|^2$  e reflexão  $R = |r|^2$ .

No caso do elétron possuir energia cinética menor que a altura da barreira, a equação de onda da região II assume outra forma. Esta é representada a seguir na Equação 3.6.

$$\psi_{II} = A_{II} e^{ik_{II}x} + B_{II} e^{-ik_{II}x} \quad (3.6)$$

O termo complexo aparece devido ao fato da energia  $E$  do elétron ser menor que o potencial  $V_0$  da barreira, logo  $\sqrt{-\frac{2m((V_B - V_A) - E)}{h}}$  assume um valor não permitido no conjunto de números reais,  $k_{II} = i\sqrt{\frac{2m((V_B - V_A) - E)}{h}}$ .

A solução que apresenta o termo complexo tem que ser usada para indicar o comportamento ondulatório do elétron em todas as regiões de propagação da onda. Quando o elétron estiver em uma região onde a energia é menor que a da barreira, ele apresenta duas porções de onda, uma se deslocando para a direita, porção referente a transmissão, e outra se deslocando para a esquerda, porção referente a reflexão. No caso onde o elétron entre em uma região onde seu potencial é menor que o da barreira, não existe mais o comportamento oscilatório, da porção referente a transmissão e reflexão, cada porção apresenta características de redução exponencial.

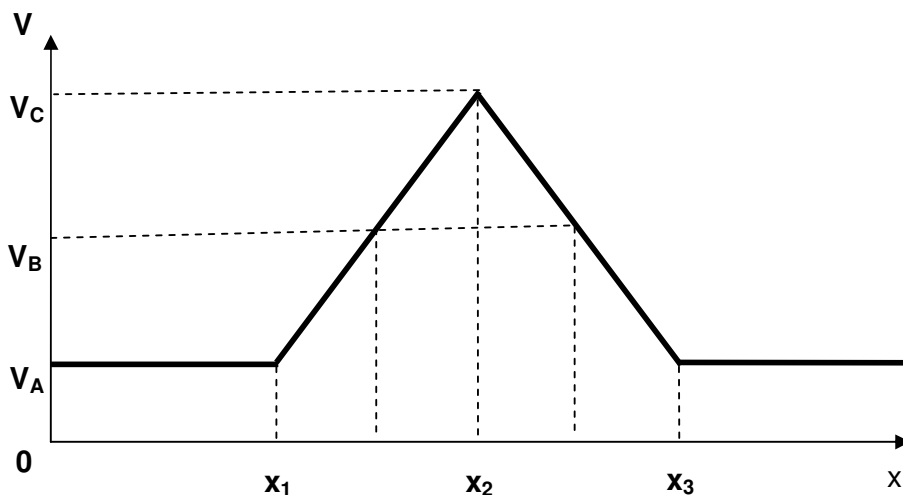
Neste sistema é possível observar o aparecimento de um fenômeno quântico denominado tunelamento. Este fenômeno está relacionado com o valor da energia do elétron, que é menor que a altura da barreira. Ele ocorre quando a amplitude da função de onda do elétron e a largura da barreira são suficientes para que o elétron propague dentro da barreira e possa, assim, atravessá-la. A medida que o elétron percorre este caminho, a amplitude da função de onda e a probabilidade de sua transmissão cai exponencialmente.

O problema com relação ao tunelamento está na miniaturização de dispositivos. Atualmente, a medida que se miniaturiza um dispositivo, aumenta-se a probabilidade de

ocorrência do tunelamento. É o que ocorre, por exemplo, quando o elétron consegue atravessar uma região eletricamente isolada.

## 3.2 Barreira de Potencial Triangular

Um segundo exemplo de sistema de baixa dimensionalidade consiste num arranjo de átomos que dá origem a uma variação contínua linear do potencial efetivo. Esta variação pode representar, por exemplo, uma liga de dois átomos cuja concentração varia linearmente com a posição na direção  $x$ , ou numa região do espaço, onde aplica-se um campo eletrostático constante. O perfil de potencial no qual estamos interessados está ilustrado na Figura 3.3.



**Figura 3.3:** Barreira de Potencial formada por átomos A, B e C, sendo que o potencial  $V_A$  é menor que o potencial  $V_B$  e este menor que o  $V_C$ .

O potencial deste sistema pode ser descrito matematicamente na forma:

$$V(x) = V_A, \text{ para } x < x_1$$

$$V(x) = \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) (x - x_1) + V_a \text{ para } x_1 < x < x_2$$

$$V(x) = \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_3} \right) (x - x_3) + V_a \text{ para } x_2 < x < x_3$$

$$V(x) = V_A \text{ para } x > x_3$$

Neste tipo de sistema, é observado um comportamento diferente para a partícula clássica. Diferente do comportamento perante uma barreira de potencial retangular, a partícula clássica consegue penetrar na região da barreira e é repelida pela força originada do potencial da barreira, que faz com que se altere o momento linear fazendo com que a velocidade mude de sinal. Para valores de energia acima da altura da barreira, a partícula clássica penetra na região, a sua energia passa a ser cinética mais potencial, logo a sua energia cinética é reduzida e o seu momento também, fazendo com que a velocidade nesta região se reduza. Quando deixa a região da barreira de potencial a sua velocidade retorna ao valor da velocidade da região I. Agora será apresentada a solução da equação de Schrödinger para a barreira de potencial triangular com partículas quânticas como mostra a Figura 3.4.

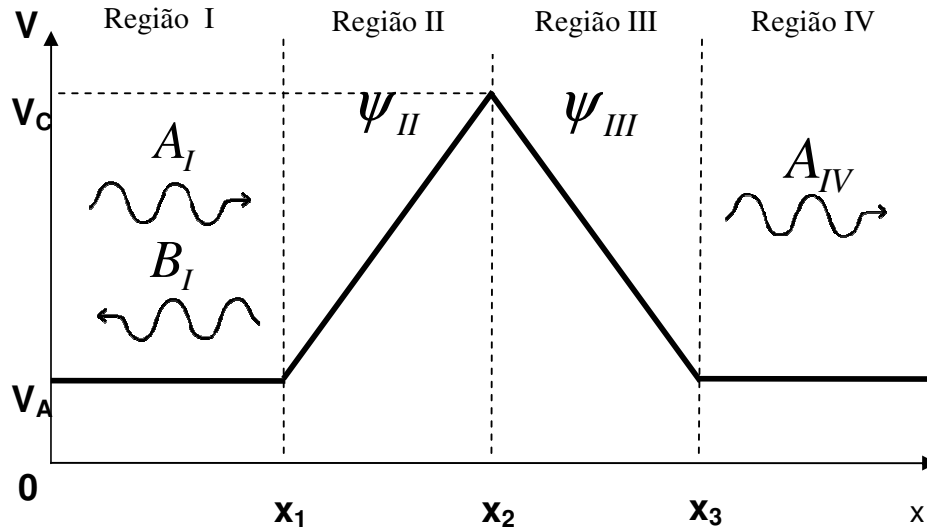


Figura 3.4: Barreira Triangular com ondas de propagação por região.

Na região I a solução é uma superposição de ondas planas propagando-se para a esquerda e para a direita como indicado na Equação 3.6.

$$\psi_I = A_I e^{ik_1 x} + B_I e^{-ik_1 x} \quad (3.6)$$

Região II:

Supomos que é possível expressar a solução da equação de Schrödinger com

potencial linear,  $V_0 = \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) (x - x_1) + V_a$ , como uma série de Taylor,  $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ .

Substituindo  $\psi$  e  $V_0$  na Equação de Schrödinger, temos:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left( \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \right) + \left[ \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) (x - x_2) + V_c \right] \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = E \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} n(n-1) \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} + \left[ \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) (x - x_2) \right] \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n + V_c \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = E \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} n(n-1) \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+1} - \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n + V_c \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = E \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} n(n-1) \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+1} = \left( E - V_c + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (3.7)
\end{aligned}$$

Substituindo  $n = n + 2$  no termo mais a esquerda na Equação 3.7, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (n+1)(n+2) \sum_{n=0}^{\infty} a_{n-2} x^n + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+1} = \left( E - V_c + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad (3.8)$$

Trocando o valor de  $n$  no segundo termo da direita para a esquerda da Equação 3.8 para  $n-1$ , temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (n+1)(n+2) \sum_{n=0}^{\infty} a_{n-2} x^n + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \left( E - V_c + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \right) \quad (3.9)$$

Expandimos os a primeira e última séries uma vez da Equação 3.9, ficando:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{m} a_2 - \frac{\hbar^2}{2m} (n+1)(n+2) \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-2} x^n + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1} x^n = \\
& = \left( E - V_c + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \right) a_0 + \left( E - V_c + \left( \frac{V_c - V_a}{x_2 - x_1} \right) x_2 \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n
\end{aligned}$$

Agora, agrupando os termos correspondentes de ambos os lados, chegamos a uma expressão para  $a_2$ , Equação 3.12, e uma relação de recorrência para  $a_n$ , Equação 3.11.

Assim a série de Taylor que é solução da equação de Schrödinger para um potencial linear é dada pela Equação 3.10:

$$\psi_{II} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left( x - \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \right)^n \quad (3.10)$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} \right) (x_1) \right] + E \right] a_{n-2} - \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))} \quad (3.11)$$

com  $n > 3$  e

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} x_1 \right) \right] a_0 \quad (3.12)$$

Onde os termos da série dependem das constantes arbitrárias  $a_0$  e  $a_1$ .

Na região região III a solução é análoga à da região II:

$$\psi_{III} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left( x - \left( \frac{x_2 + x_3}{2} \right) \right)^n, \text{ com}$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)} \right) (x_3) \right] + E \right] a_{n-2} + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))}$$

com  $n > 3$  e

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)} \cdot x_3 \right) \right] a_0$$

Na região IV temos apenas uma onda plana propagando-se para a direita,

$$\psi_{IV} = A_{IV} e^{ik_{IV}x}$$

onde :

$$k_I = k_{IV} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



É importante ressaltar que cada  $\psi$  é composto por uma porção de onda que caminha, uma para a direita, e a outra para a esquerda, na região I.

A equação de Schrödinger na região em que o potencial varia linearmente não permite solução analítica com forma fechada. Entretanto, como é uma equação diferencial linear, é possível encontrar uma solução analítica na forma de uma série de Taylor. A idéia é que, substituindo-se a série na equação diferencial, encontram-se equações algébricas para os coeficientes da série. Nota-se que na região IV é apresentada apenas a porção de onda que caminha para a direita, pois supôs-se que o elétron incide na barreira da esquerda para a direita, e não há nenhum processo físico que possa fazer com que a partícula tenha velocidade negativa na região IV.

Conforme mencionado no capítulo anterior, para que a função de onda obedeça a equação de Schrödinger, independente do tempo, a própria função e sua derivada devem ser contínuas em todos os pontos do espaço, inclusive nos pontos de descontinuidade do potencial.

Sendo assim impomos as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1) &= \psi_{II}(x_1) & \psi_{II}(x_2) &= \psi_{III}(x_2) & \psi_{III}(x_3) &= \psi_{IV}(x_3) \\ \psi'_I(x_1) &= \psi'_{II}(x_1) & \psi'_{II}(x_2) &= \psi'_{III}(x_2) & \psi'_{III}(x_3) &= \psi'_{IV}(x_3) \end{aligned}$$

que fornecem seis equações algébricas. Precisamos a princípio determinar sete coeficientes  $A_I$ ,  $B_I$ ,  $a_0^I$ ,  $a_1^I$ ,  $a_0^{II}$ ,  $a_1^{II}$  e  $A_{III}$ . Note, entretanto, que  $A_I$ , representa a probabilidade de encontrar um elétron na região I incidindo sobre a barreira, como podemos controlar a incidência de elétrons, tomamos  $A_I = 1$ , ou seja, estamos estudando a situação em que temos certeza em que um elétron incidiu sobre a barreira, como feito anteriormente.

É fácil perceber que é possível, escrever as funções de ondas das regiões II e III em termos de  $a_0$  e  $a_1$ :

$$\psi(x) = a_0 \phi_0(x) + a_1 \phi_1(x) \quad (3.13)$$

onde  $\phi_0$  e  $\phi_1$  são obtidos com o auxílio das relações de recorrência para os  $a_n$ .

Agora o sistema é composto por 6 equações:

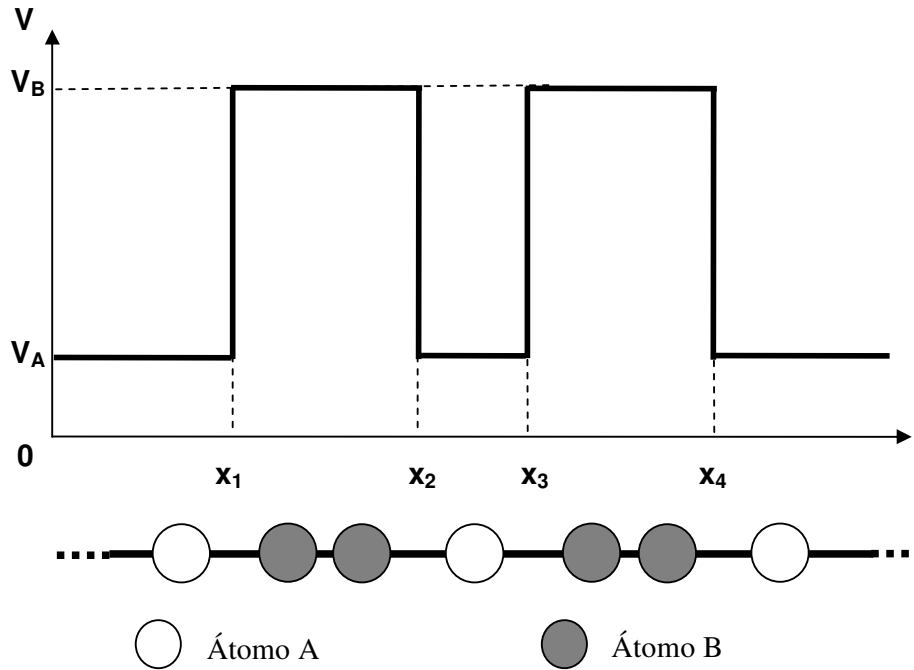
$$\left\{ \begin{array}{l} e^{iK_I x_1} + B_I e^{-iK_I x_1} = a_0^{II} \phi_0^{II}(x_1) + a_1^{II} \phi_1^{II}(x_1) \\ ik_I (e^{iK_I x_1} - B_I e^{-iK_I x_1}) = a_0^{II} \frac{d\phi_0^{II}(x_1)}{dx} + a_1^{II} \frac{d\phi_1^{II}(x_1)}{dx} \\ a_0^{II} \phi_0^{II}(x_2) + a_1^{II} \phi_1^{II}(x_2) = a_0^{III} \phi_0^{III}(x_2) + a_1^{III} \phi_1^{III}(x_2) \\ a_0^{II} \frac{d\phi_0^{II}(x_2)}{dx} + a_1^{II} \frac{d\phi_1^{II}(x_2)}{dx} = a_0^{III} \frac{d\phi_0^{III}(x_2)}{dx} + a_1^{III} \frac{d\phi_1^{III}(x_2)}{dx} \\ a_0^{III} \phi_0^{III}(x_3) + a_1^{III} \phi_1^{III}(x_3) = A_{IV} e^{iK_{IV} x_3} \\ a_0^{III} \frac{d\phi_0^{III}(x_3)}{dx} + a_1^{III} \frac{d\phi_1^{III}(x_3)}{dx} = ik_I A_{IV} e^{iK_{IV} x_3} \end{array} \right.$$

Com a solução do sistema, pode-se calcular o valor dos coeficientes de transmissão e do de reflexão.

Novamente, é observado que a partícula tendo uma energia menor que a da altura da barreira possui a probabilidade de se transmitir através dela. Este fenômeno é o tunelamento, mencionado anteriormente, que ocorre quando a partícula ainda possui amplitude de onda capaz de se transmitir através da barreira.

### 3.3 Dupla Barreira de Potencial Retangular

Este modelo é formado por duas barreiras de potencial retangular com alturas iguais a  $V_0$ , posicionadas de forma que fiquem a uma distância  $d$ ,  $d = x_3 - x_2$ , formando um poço de potencial que acrescenta características a este modelo conforme ilustra a Figura 3.5. A variação desta distância influenciará os resultados.



**Figura 3.5:** Dupla Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial  $V_A$  é menor que o potencial  $V_B$ .

O poço de potencial obriga que a partícula quântica tenha a sua energia igual a um dos níveis de energia quantizados para que possa ser transmitida.

Uma partícula clássica confinada dentro deste poço com uma energia  $E \geq 0$  poderia oscilar entre as paredes com qualquer quantidade de energia. Já as partículas quânticas estão sujeitas a níveis de energia quantizados, podendo somente assumir estes valores para que se transmita pelas barreiras e pelo poço.

Quando a partícula quântica atinge a primeira barreira, ela deve ter a sua energia igual a um dos níveis quantizados de energia das barreiras e do poço de forma que consiga a sua transmissão.

O potencial deste sistema pode ser descrito matematicamente na forma:

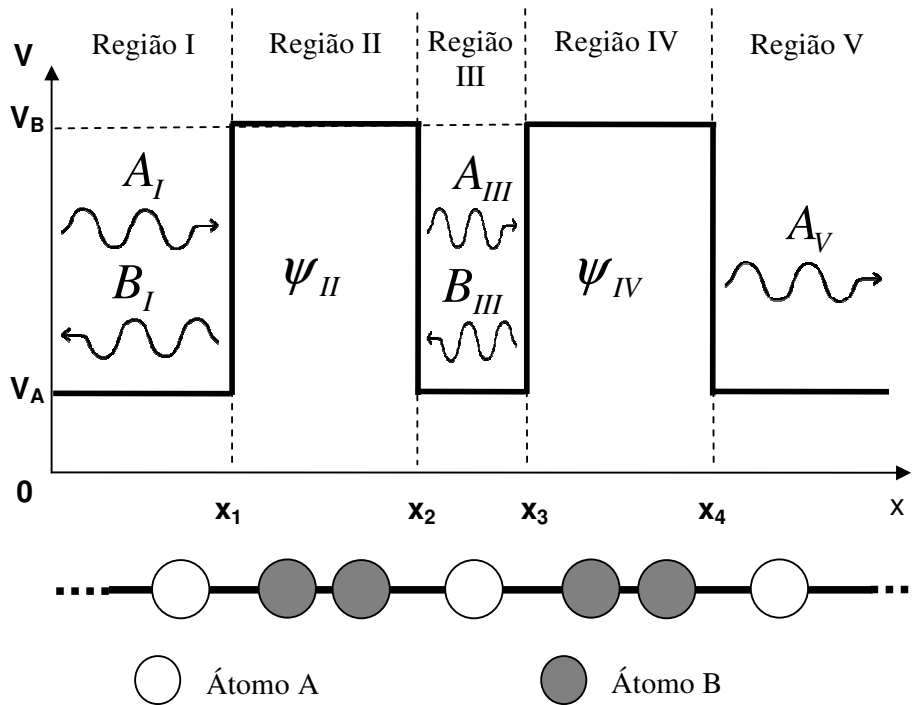
$$V(x) = V_A \text{ para } x < x_1$$

$$V(x) = V_B \text{ para } x_1 < x < x_2$$

$$V(x) = V_A \text{ para } x_2 < x < x_3$$

$$V(x) = V_B \text{ para } x_3 < x < x_4$$

$$V(x) = V_A \text{ para } x > x_4$$



**Figura 3.6:** Dupla Barreira de Potencial formada por átomos A e B, sendo que o potencial  $V_A$  é menor que o potencial  $V_B$ .

Uma partícula clássica sujeita a este potencial sofre a ação de uma força impulsiva para a esquerda na primeira descontinuidade. Se sua energia cinética for maior que a energia potencial na região II ela continua propagando-se nesta região com uma velocidade  $v_{II} < v_I$ . Ao atingir a segunda descontinuidade, ela sofre uma força impulsiva para a direita, e entra na região III, com sua velocidade original  $v_I$ . Ao atingir a próxima descontinuidade volta a se mover com velocidade  $v_{IV} < v_{III}$ . Conseguindo atingir a quarta descontinuidade ela sofre novamente uma força impulsiva para a direita, e entra na região V com velocidade igual a da região III. Se a energia cinética da partícula for menor que a altura da barreira, a força impulsiva na primeira descontinuidade faz com que a velocidade da partícula mude de sinal, e ela passa a se mover para a esquerda. Uma partícula quântica, entretanto comporta-se de maneira bastante distinta como vemos a seguir.

Assim as equações de onda para cada região, quando a energia do elétron é  $E$ , são:

Região I:

$$\psi_I = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \quad (3.14)$$

Região II:

$$\psi_{II} = A_{II}e^{-\alpha_{II}x} + B_{II}e^{\alpha_{II}x} \quad (3.15)$$

Região III:

$$\psi_{III} = A_{III}e^{ik_{III}x} + B_{III}e^{-ik_{III}x} \quad (3.16)$$

Região IV:

$$\psi_{IV} = A_{IV}e^{-\alpha_{IV}x} + B_{IV}e^{\alpha_{IV}x} \quad (3.17)$$

Região V:

$$\psi_V = A_Ve^{ik_Vx} \quad (3.18)$$

onde :

$$k_i = k_{III} = k_V = \sqrt{\frac{2mE}{h}} \text{ e } \alpha_{II} = \alpha_{IV} = \sqrt{\frac{2m((V_B - V_A) - E)}{h}}$$

Para resolver o sistema composto por estas equações, adotam-se as condições de contorno vistas anteriormente.

Ressalta-se que cada  $\psi$  é composto por uma porção de onda que caminha, uma para a direita, e a outra para a esquerda, nas regiões I, II, III e IV como mostra a Figura 3.6. Nota-se que na região V é apresentada apenas a porção de onda que caminha para a esquerda, supôs-se que o elétron incide na barreira da esquerda para a direita, e não há nenhum processo físico que possa fazer com que a partícula tenha velocidade negativa na região V, como visto anteriormente.

Conforme mencionado anteriormente, para que a função de onda obedeça a equação de Schrödinger, independente do tempo, a própria função e sua derivada devem ser contínuas em todos os pontos do espaço inclusive nos pontos de descontinuidade do potencial.

Sendo assim, impomos as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1) = \psi_{II}(x_1) \quad \psi_{II}(x_2) = \psi_{III}(x_2) \quad \psi_{III}(x_3) = \psi_{IV}(x_3) \quad \psi_{IV}(x_4) = \psi_V(x_4) \\ \psi'_I(x_1) = \psi'_{II}(x_1) \quad \psi'_{II}(x_2) = \psi'_{III}(x_2) \quad \psi'_{III}(x_3) = \psi'_{IV}(x_3) \quad \psi'_{IV}(x_4) = \psi'_V(x_4) \end{aligned}$$

que fornecem oito equações algébricas. Precisamos, a princípio determinar nove coeficientes  $A_I, B_I, A_{II}, B_{II}, A_{III}, B_{III}, A_{IV}, B_{IV}$  e  $A_V$ . Note, entretanto, que  $A_I$ , representa a probabilidade de encontrar um elétron na região I incidindo sobre a barreira, como podemos controlar a incidência de elétrons sobre a barreira tomamos  $A_I = 1$ , ou seja,

estamos estudando a situação em que temos certeza em que um elétron incidu sobre a barreira.

Agora o sistema a ser resolvido é composto por 8 equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{iK_I x_1} + B_I e^{-iK_I x_1} = A_{II} e^{-\alpha x_1} + B_{II} e^{\alpha x_1} \\ ik_I (e^{iK_I x_1} - B_I e^{-iK_I x_1}) = \alpha (-A_{II} e^{-\alpha x_1} + B_{II} e^{\alpha x_1}) \\ A_{II} e^{-\alpha_{II} x_2} + B_{II} e^{\alpha_{II} x_2} = A_{III} e^{iK_{III} x_2} + B_{III} e^{-iK_{III} x_2} \\ \alpha_{II} (-A_{II} e^{-\alpha_{II} x_2} + B_{II} e^{\alpha_{II} x_2}) = ik (A_{III} e^{iK_{III} x_2} - B_{III} e^{-iK_{III} x_2}) \\ A_{III} e^{iK_{III} x_3} + B_{III} e^{-iK_{III} x_3} = A_{IV} e^{-\alpha_{IV} x_3} + B_{IV} e^{\alpha_{IV} x_3} \\ ik_{III} (A_{III} e^{iK_{III} x_3} - B_{III} e^{-iK_{III} x_3}) = \alpha (-A_{IV} e^{-\alpha_{IV} x_3} + B_{IV} e^{\alpha_{IV} x_3}) \\ A_{IV} e^{-\alpha_{IV} x_4} + B_{IV} e^{\alpha_{IV} x_4} = A_V e^{ik_V x_4} \\ \alpha_{IV} (-A_{IV} e^{-\alpha_{IV} x_4} + B_{IV} e^{\alpha_{IV} x_4}) = ik_V A_V e^{ik_V x_4} \end{array} \right.$$

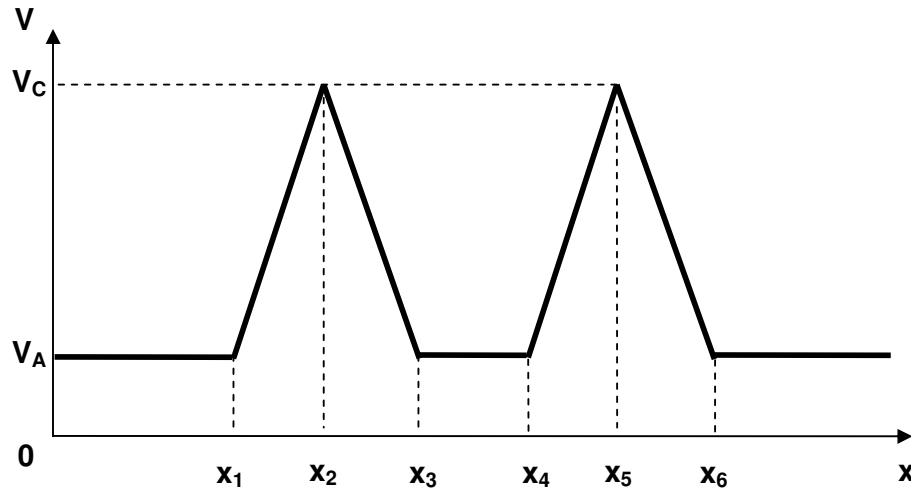
Com a solução do sistema, pode-se calcular o valor dos coeficientes de transmissão e de reflexão.

Com relação a energia menor que a da barreira, a partícula neste modelo apresenta uma probabilidade, mesmo pequena, de se transmitir por ela, este fenômeno visto anteriormente é o tunelamento.

### 3.4 Dupla Barreira de Potencial Triangular

Este modelo é formado por duas barreiras de potencial triangular posicionadas a uma distância  $d$ . Neste modelo também é formado um poço de potencial entre as barreiras, como visto anteriormente.

O perfil de potencial no qual estamos interessados está ilustrado na Figura 3.7.



**Figura 3.7:** Dupla Barreira de Potencial Triangular formada por átomos A, B e C, sendo que o potencial  $V_A$  é menor que o  $V_B$  e este menor que o  $V_C$ .

O potencial deste sistema pode ser descrito matematicamente na forma:

$$V(x) = V_A, \text{ para } x < x_1$$

$$V(x) = \left( \frac{V_C - V_A}{x_2 - x_1} \right) (x - x_1) + V_A \text{ para } x_1 < x < x_2$$

$$V(x) = \left( \frac{V_C - V_A}{x_2 - x_3} \right) (x - x_2) + V_C \text{ para } x_2 < x < x_3$$

$$V(x) = V_A \text{ para } x_3 < x < x_4$$

$$V(x) = \left( \frac{V_C - V_A}{x_5 - x_4} \right) (x - x_4) + V_A \text{ para } x_4 < x < x_5$$

$$V(x) = \left( \frac{V_C - V_A}{x_6 - x_5} \right) (x - x_5) + V_A \text{ para } x_5 < x < x_6$$

$$V(x) = V_A \text{ para } x > x_6$$

Uma partícula clássica com energia cinética maior que a energia potencial das barreiras, quando entra na região II da primeira barreira, tem a sua velocidade  $v_I$  reduzida de forma  $v_{II} < v_I$  devido ao potencial da barreira, e ao passar para a região III mantém a sua velocidade  $v_{III} = v_{II}$ . Ao sair da região III da primeira barreira, retorna a sua velocidade original  $v_I$ . Quando penetra na região V da segunda barreira, tem a sua velocidade  $v_{III}$  novamente reduzida  $v_{IV} < v_{III}$  devido a energia potencial da segunda barreira. Passando para a região VI tem a sua velocidade mantida  $v_V = v_{VI}$ . Ao sair da segunda barreira a sua

velocidade  $v_{VII}$  volta novamente aos valores iniciais. Para a partícula quântica o comportamento é alterado, como vemos a seguir.

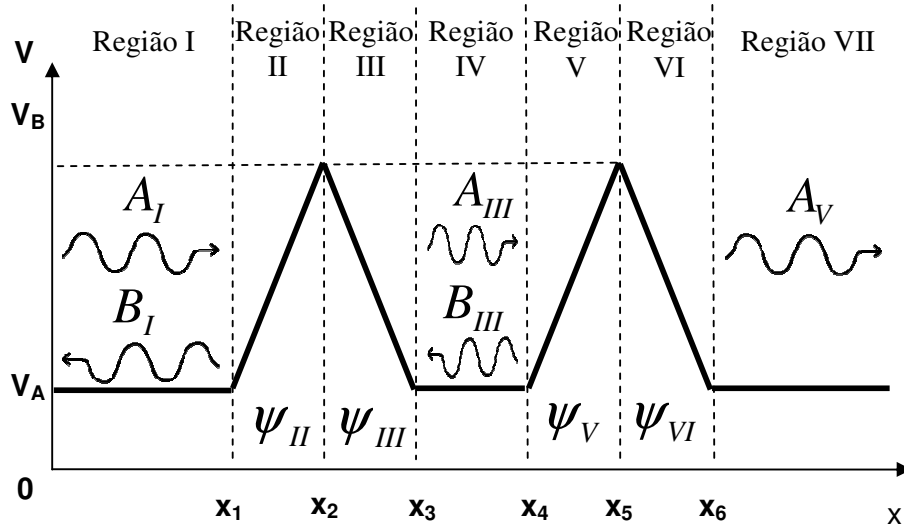


Figura 3.8: Dupla Barreira Retangular com ondas de propagação por região.

As equações de onda para cada região, quando a energia do elétron é menor que a da barreira, são:

Região I:

$$\psi_I = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \quad (3.19)$$

Região II:\*

$$\psi_{II} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left( x - \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \right)^n, \text{ com} \quad (3.20)$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} \right) (x_1) \right] + E \right] a_{n-2} - \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))} \quad (3.21)$$

com  $n > 3$  e

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_2 - x_1)} \right) x_1 \right] a_0 \quad (3.22)$$

Região III:



$$\psi_{II} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(x - \left(\frac{x_2 + x_3}{2}\right)\right)^n, \text{ com} \quad (3.23)$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)}(x_3) \right) + E \right] a_{n-2} + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))} \text{ com } n > 3 \text{ e} \quad (3.24)$$

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_3 - x_2)} x_3 \right) \right] a_0 \quad (3.25)$$

Região IV:

$$\psi_{IV} = A_{IV} e^{ik_{IV}x} + B_{IV} e^{-ik_{IV}x} \quad (3.26)$$

Região V:

$$\psi_{II} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(x - \left(\frac{x_4 + x_5}{2}\right)\right)^n, \text{ com} \quad (3.27)$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_5 - x_4)}(x_4) \right) + E \right] a_{n-2} - \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_5 - x_4)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))} \quad (3.28)$$

com  $n > 3$  e

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_5 - x_4)} x_4 \right) \right] a_0 \quad (3.29)$$

Região VI:

$$\psi_{II} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(x - \left(\frac{x_5 + x_6}{2}\right)\right)^n, \text{ com} \quad (3.30)$$

$$a_n = \left\{ \left[ \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_6 - x_5)}(x_5) \right) + E \right] a_{n-2} - \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_6 - x_5)} \right) a_{n-3} \right\} \frac{1}{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) (n(n-1))} \quad (3.31)$$

com  $n > 3$  e

$$a_2 = \frac{1}{2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right)} \left[ E + \left( \frac{(V_C - V_A)}{(x_6 - x_5)} x_4 \right) \right] a_0 \quad (3.32)$$

Região VII

$$\psi_{VII} = A_{VII} e^{ik_{VII}x} \quad (3.33)$$

onde :

$$k_I = k_{IV} = k_{VII} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

É importante ressaltar que cada  $\psi$  é composto por uma porção de onda que caminha, uma para a direita, e a outra para a esquerda, na região I e IV. Nas regiões II, III, V e VI, utilizamos uma série de Taylor como feito anteriormente para definir as porções de onda nestas regiões. Na região VII, existe apenas uma porção de onda que caminha para a direita. Supôs-se que o elétron incide na barreira da esquerda para a direita, e não há nenhum processo físico que possa fazer com que a partícula tenha velocidade negativa na região VII como mostra a Figura 3.8.

Conforme mencionado anteriormente, para que a função de onda obedeça a equação de Schrödinger, independente do tempo, a própria função e sua derivada devem ser contínuas em todos os pontos do espaço, inclusive nos pontos de descontinuidade do potencial.

Sendo assim impomos as condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1) &= \psi_{II}(x_1) & \psi_{II}(x_2) &= \psi_{III}(x_2) & \psi_{III}(x_3) &= \psi_{IV}(x_3) \\ \psi'_I(x_1) &= \psi'_{II}(x_1) & \psi'_{II}(x_2) &= \psi'_{III}(x_2) & \psi'_{III}(x_3) &= \psi'_{IV}(x_3) \\ \psi_{IV}(x_4) &= \psi_V(x_4) & \psi_V(x_5) &= \psi_{VI}(x_5) & \psi_{VI}(x_6) &= \psi_{VII}(x_6) \\ \psi'_{IV}(x_4) &= \psi'_V(x_4) & \psi'_V(x_5) &= \psi'_{VI}(x_5) & \psi'_{VI}(x_6) &= \psi'_{VII}(x_6) \end{aligned}$$

que fornecem doze equações algébricas. Precisamos a princípio determinar treze coeficientes  $A_I, B_I, a_0^I, a_1^I, a_0^{II}, a_1^{II}, A_{IV}, B_{IV}, a_0^V, a_1^V, a_0^{VI}, a_1^{VI}$  e  $A_{VII}$ . Note, entretanto, que  $A_I$ , representa a probabilidade de encontrar um elétron na região I incidindo sobre a barreira, como podemos controlar a incidência de elétrons sobre a barreira tomamos  $A_I = 1$ , ou seja, estamos estudando a situação em que temos certeza em que um elétron incidiu sobre a barreira.

Como feito anteriormente, escrevemos as funções de ondas das regiões II, III, V e VI em termos de  $a_0$  e  $a_1$ :

$$\psi(x) = a_0 \phi_0(x) + a_1 \phi_1(x)$$

Onde  $\phi_0$  e  $\phi_1$  são obtidos com o auxílio das relações de recorrência para  $a_n$ .

Agora o sistema é composto por 12 equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{ik_I x_1} + B_I e^{-ik_I x_1} = a_0^{II} \phi_0^{II}(x_1) + a_1^{II} \phi_1^{II}(x_1) \\ ik_I (e^{ik_I x_1} - B_I e^{-ik_I x_1}) = a_0^{II} \frac{d\phi_0^{II}(x_1)}{dx} + a_1^{II} \frac{d\phi_1^{II}(x_1)}{dx} \\ a_0^{II} \phi_0^{II}(x_2) + a_1^{II} \phi_1^{II}(x_2) = a_0^{III} \phi_0^{III}(x_2) + a_1^{III} \phi_1^{III}(x_2) \\ a_0^{II} \frac{d\phi_0^{II}(x_2)}{dx} + a_1^{II} \frac{d\phi_1^{II}(x_2)}{dx} = a_0^{III} \frac{d\phi_0^{III}(x_2)}{dx} + a_1^{III} \frac{d\phi_1^{III}(x_2)}{dx} \\ a_0^{III} \phi_0^{III}(x_3) + a_1^{III} \phi_1^{III}(x_3) = A_{IV} e^{ik_{IV} x_3} + B_{IV} e^{-ik_{IV} x_3} \\ a_0^{III} \frac{d\phi_0^{III}(x_3)}{dx} + a_1^{III} \frac{d\phi_1^{III}(x_3)}{dx} = ik_{IV} (A_{IV} e^{ik_{IV} x_3} + B_{IV} e^{-ik_{IV} x_3}) \\ A_{IV} e^{ik_{IV} x_4} + B_{IV} e^{-ik_{IV} x_4} = a_0^V \phi_0^V(x_4) + a_1^V \phi_1^V(x_4) \\ ik_{IV} (A_{IV} e^{ik_{IV} x_4} + B_{IV} e^{-ik_{IV} x_4}) = a_0^V \frac{d\phi_0^V(x_4)}{dx} + a_1^V \frac{d\phi_1^V(x_4)}{dx} \\ a_0^V \phi_0^V(x_5) + a_1^V \phi_1^V(x_5) = a_0^{VI} \phi_0^{VI}(x_5) + a_1^{VI} \phi_1^{VI}(x_5) \\ a_0^V \frac{d\phi_0^V(x_5)}{dx} + a_1^V \frac{d\phi_1^V(x_5)}{dx} = a_0^{VI} \frac{d\phi_0^{VI}(x_5)}{dx} + a_1^{VI} \frac{d\phi_1^{VI}(x_5)}{dx} \\ a_0^{VI} \phi_0^{VI}(x_6) + a_1^{VI} \phi_1^{VI}(x_6) = A_{VII} e^{ik_{VII} x_6} \\ a_0^{VI} \frac{d\phi_0^{VI}(x_6)}{dx} + a_1^{VI} \frac{d\phi_1^{VI}(x_6)}{dx} = ik_{VII} A_{VII} e^{ik_{VII} x_6} \end{array} \right.$$

Com a solução do sistema, pode-se calcular o valor dos coeficientes de transmissão e de reflexão.

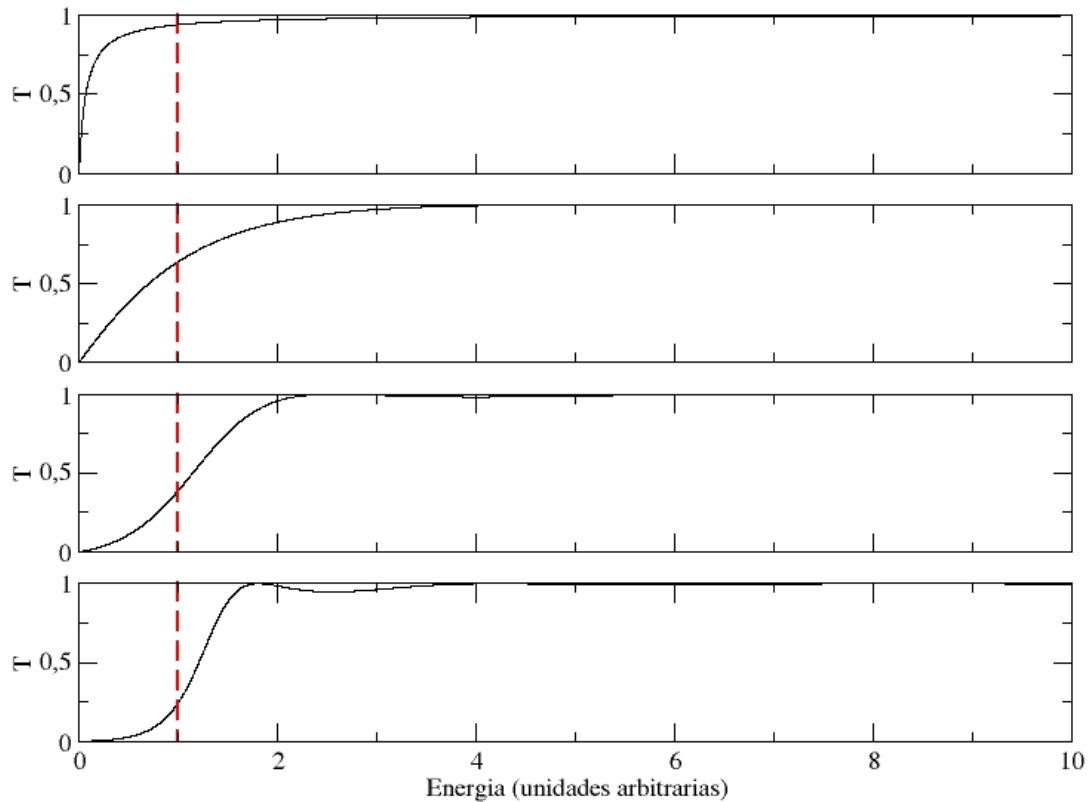
Neste modelo, também é avaliado que a partícula possui, mesmo que mínima, a probabilidade de se transmitir pela barreira tendo uma energia menor que a sua altura. Este caso já visto anteriormente recebe o nome de tunelamento.

# 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

## 4.1 Barreira de Potencial Retangular

Apresentaremos inicialmente os resultados para o coeficiente de transmissão de uma única barreira retangular. O objetivo é entender como os parâmetros geométricos do sistema (neste caso a largura da barreira) influenciam no comportamento dos elétrons que se movem no sistema. Conforme vimos anteriormente, este modelo é caracterizado pela largura da barreira e pela sua altura (em energia). Estamos interessados no comportamento do coeficiente de transmissão como função da energia do elétron incidente. A Figura 4.1 mostra  $T(E)$  para valores diferentes de  $L$ .

As linhas tracejadas representam a altura das barreiras,  $V_0$ . A energia esta expressa em unidades arbitrárias (de forma que  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$ ).



**Figura 4.1:** Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura 0.5, 1.5, 2.5 e 3.5 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. A linha tracejada representa a altura da barreira,  $V_0$ .

Para energias  $E$  do elétron incidente menores que a energia da barreira,  $V_0$ , a transmissão é dominada pelo fenômeno do tunelamento. A função de onda na região da barreira é exponencial real, e a probabilidade de transmissão cai exponencialmente com a largura da barreira. Isto reflete-se nos valores de transmissão cada vez menores para largura cada vez maior na região  $E < V_0$ . Nos gráficos da Figura 4.1, analisados de cima para baixo.

Para valores de  $E$  acima da altura da barreira  $V_0$  observa-se que a probabilidade de transmissão começa a apresentar oscilações. Estas são devidas às interferências quânticas entre as ondas refletidas nas duas descontinuidades do potencial. Como a energia  $E$  e o comprimento da onda eletrônica  $\lambda$  estão diretamente relacionados as condições para as interferências construtivas e destrutivas mudam com a energia para uma largura fixa da barreira, daí as oscilações.

É importante notar que, mesmo que o elétron apresente energia acima da barreira, existe a probabilidade deste ser refletido, em claro contraste com a situação prevista pela mecânica clássica.

## 4.2 Barreira de Potencial Triangular

Os próximos resultados apresentam os resultados para o coeficiente de transmissão de uma única barreira triangular. O objetivo agora é comparar o comportamento da transmissão eletrônica frente a um potencial descontínuo (o da barreira retangular) e frente a um potencial contínuo mas abrupto. Conforme já foi visto, este modelo é caracterizado pela largura da barreira e pela sua altura máxima (em energia)  $V_0$ . A energia potencial cresce linearmente na direção de  $x$  positivo. Estamos interessados no comportamento do coeficiente de transmissão como função da energia do elétron incidente. A Figura 4.2 mostra  $T(E)$  para valores diferentes de  $L$ .

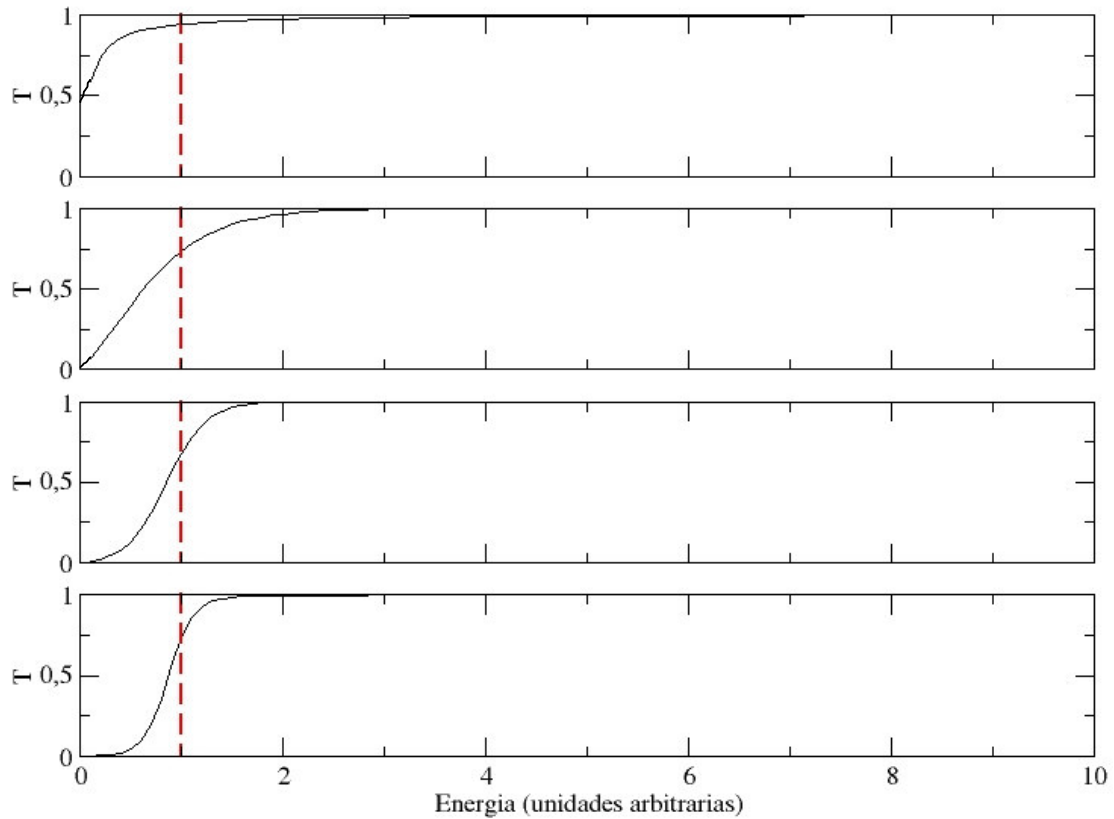
As linhas tracejadas representam a altura máxima da barreira,  $V_0$ . A energia está expressa em unidades arbitrárias (de forma que  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$ ).

Nota-se que para  $E < V_0$  e barreiras estreitas ( $L=0.5$  e  $L=1.5$ ), não há diferenças significativas entre a barreira triangular e a retangular. Este fato é compatível com a altura derivada de  $V(x)$ . No caso linear quando a barreira é estreita o efeito desta derivada muito

grande, para comprimentos de ondas muito grandes ( $E \rightarrow \infty$ ) é muito semelhante ao efeito de uma descontinuidade no potencial.

Já para barreiras mais largas ( $L=2.5$  e  $L=3.5$ ) nota-se que o coeficiente de transmissão é maior no caso triangular, o que entende-se facilmente ao ser reconhecer a “suavização” da variação de  $V(x)$  comparado ao caso retangular.

Ainda nestes gráficos é possível notar o fenômeno de tunelamento para energias abaixo da altura da barreira, isto acontece por causa da barreira apresentar uma largura que possibilite a onda penetrar e se transmitir por ela. A amplitude da onda incidente apresenta o tamanho necessário para que a partícula ultrapasse a barreira. Também é visto que a medida que se aumenta a barreira o fenômeno de tunelamento tem a sua probabilidade reduzida, apontando que este fenômeno é mais propício em barreiras com larguras mínimas.



**Figura 4.2:** Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura 0.5, 1.5, 2.5 e 3.5 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente. A linha tracejada representa a altura da barreira,  $V_0$ .

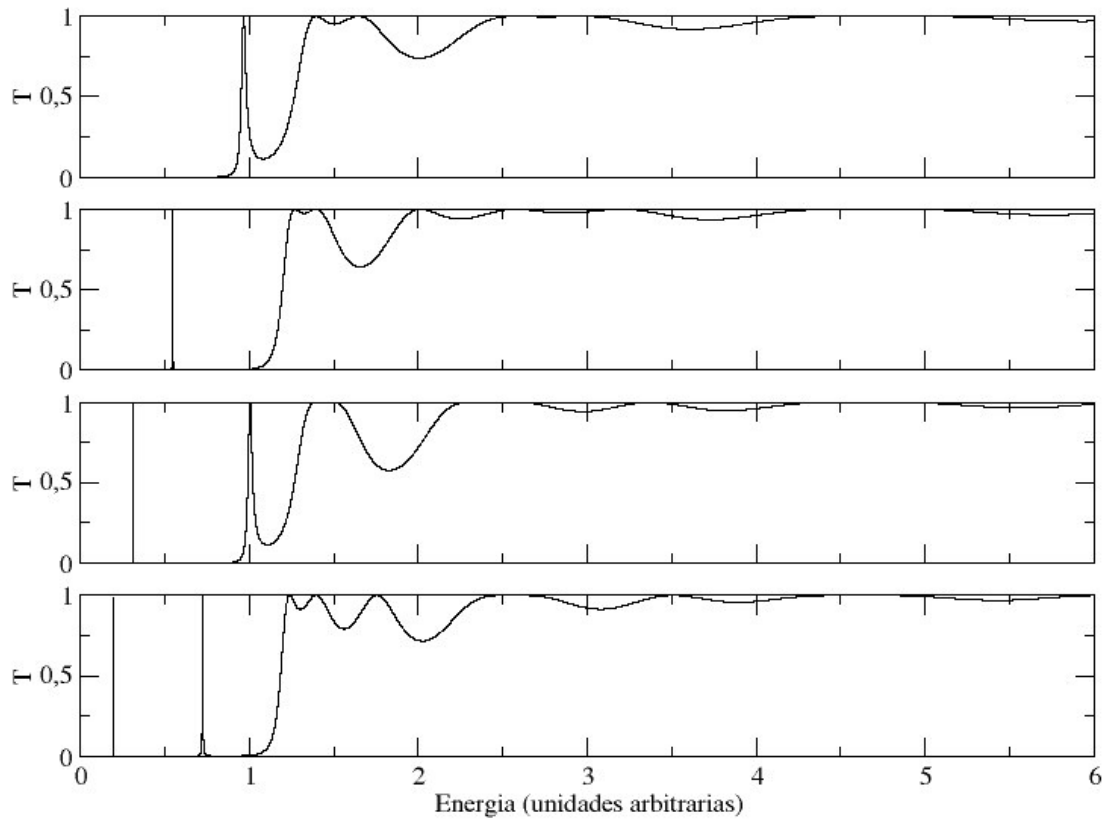
## 4.3 Dupla Barreira de Potencial Retangular

A combinação de duas barreiras retangulares em série, formando o sistema conhecido por dupla barreira, ilustra bem as características do transporte quântico que diferem radicalmente das previsões clássicas.

Classicamente espera-se que a probabilidade de transmissão através de duas barreiras em seqüência seja simplesmente a combinação das probabilidades de transmissão através de cada uma delas. Entretanto, na mecânica quântica o que se combinam são as amplitudes de probabilidade, e não as probabilidades. Estas amplitudes são, em geral, funções complexas que sofrem interferências quando combinadas.

Uma análise visual rápida da Figura 4.3 revela grandes diferenças à Figura 4.1, que corresponde à transmissão através de uma única barreira. Note que a transmissão foi quase completamente suprimida para  $E < V_0$ , restando apenas picos muito estreitos para os quais a transmissão é máxima. Para entender este comportamento precisamos levar em conta os processos de reflexão sofridos pela onda eletrônica ao atravessar a primeira barreira e penetrar no “poço” formado pelas duas barreiras. Estas reflexões múltiplas fazem com que apenas algumas energias sejam permitidas para elétrons no interior do poço. Esta quantização dos níveis de energia é observada em todo sistema no qual há confinamento, ou seja, o elétron é forçado a se mover numa região restrita espacialmente. Assim, estes picos de transmissão para  $E < V_0$  são consequência da quantização de energia no interior do poço, e são chamados de picos de transmissão ressonante. O número de picos no intervalo  $0 < E < V_0$  depende da largura do poço (da distância entre as barreiras) já que, quando maior o poço, menor o espaçamento entre os níveis.

Para  $E > V_0$  observa-se uma proliferação de oscilações, provenientes das reflexões adicionais das duas barreiras, que dão origem a mais condições de interferência destrutiva e construtiva, com uma dependência mais complicada com a energia.



**Figura 4.3:** Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 5.0 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente.

## 4.4 Dupla Barreira de Potencial Triangular

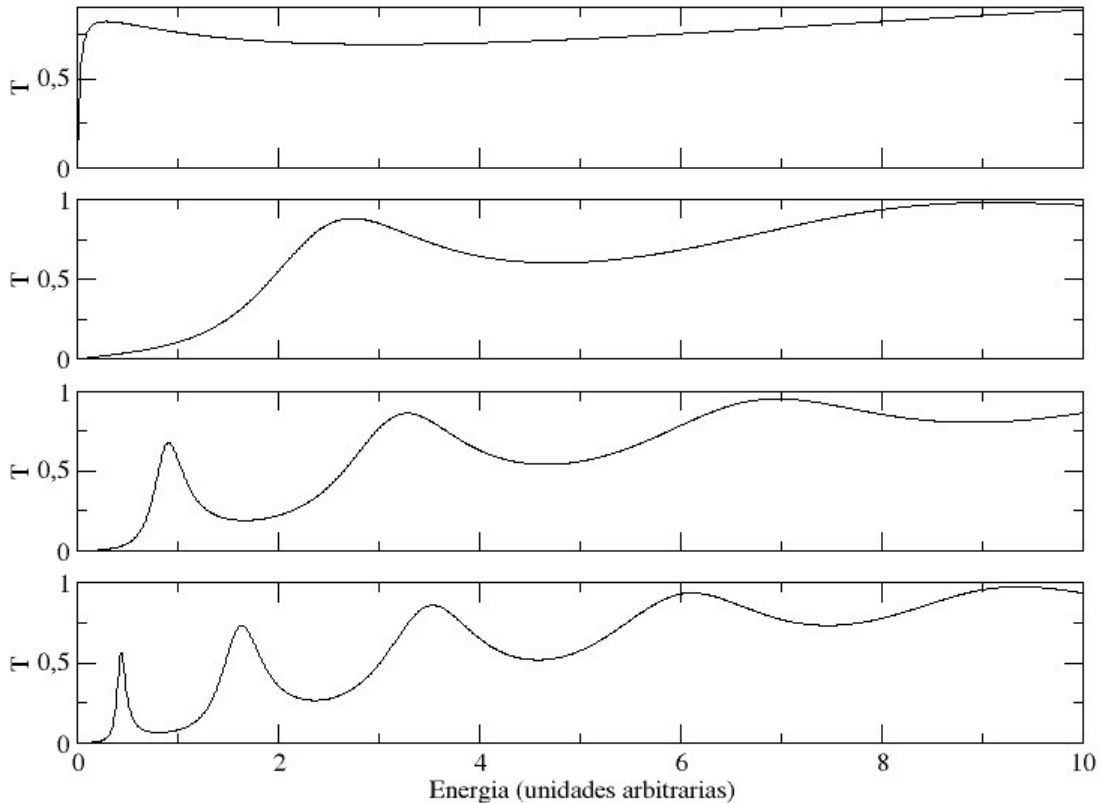
Vamos agora comparar um sistema de dupla barreira formado por duas barreiras triangulares com a dupla barreira retangular. Novamente espera-se um comportamento oscilatório de  $T(E)$  devido a interferências quânticas, mas as características devem ser distintas do caso retangular.

A primeira característica que se observa, analisando-se as figuras 4.4 e 4.5 é uma estrutura oscilatória mais simples que no caso retangular. A primeira vista isto pode parecer surpreendente, mas devemos lembrar que as únicas fontes de reflexão agora são as barreiras em si; no caso retangular havia reflexão em cada uma das descontinuidades do potencial, ou seja, em quatro pontos.

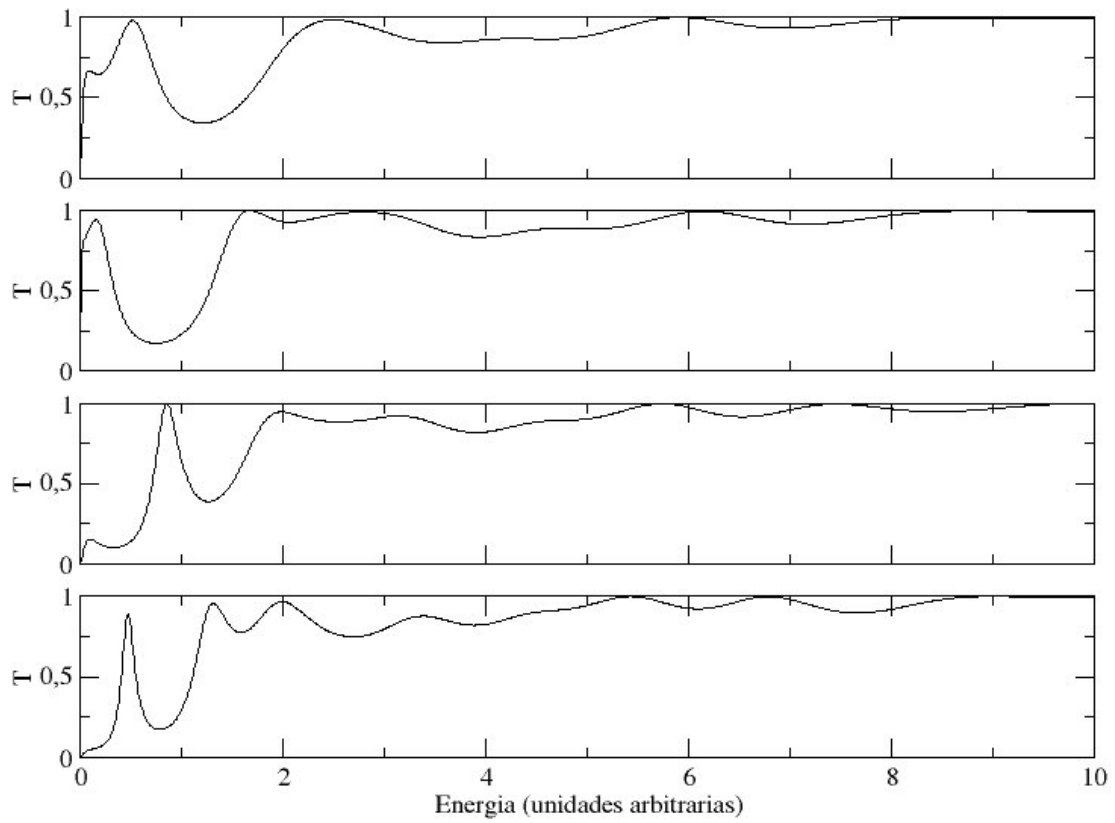


Nota-se também que os picos de transmissão ressonante são muito mais largos que no caso retangular. Sempre que ocorre um alargamento de picos de ressonância podemos associá-lo a algum tipo de dissipação ou perda. No nosso caso este alargamento significa que o poço formado entre as barreiras triangulares é menos eficiente em aprisionar o elétron do que aquele formado entre as barreiras retangulares. Isto não é surpresa, já que espera-se que uma força impulsiva, como a do caso retangular, seja mais eficiente que uma força finita em confinar partículas.

Uma outra maneira de pensar sobre o alargamento das ressonâncias está relacionada a quanto tempo um elétron colocado dentro do poço triangular permaneceria nele antes de tunelar para fora do poço. A largura muito maior no caso triangular indica que o tempo de vida do elétron dentro deste poço é muito menor do que no caso retangular, que é apenas outra forma de evidenciar a maior eficiência de confinamento deste último.



**Figura 4.4:** Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 0.5 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente.



**Figura 4.5:** Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron para barreiras de largura de 5.0 unidades de comprimento, distantes 0.5, 2.0, 3.5 e 5.0 unidades de comprimentos na ordem de cima para baixo respectivamente.

## 5 CONCLUSÕES

Neste trabalho tive a oportunidade de aplicar ferramentas e técnicas computacionais ao estudo de um problema intimamente relacionado ao desenvolvimento das tecnologias de processamento e armazenamento de informação: o transporte eletrônico.

Utilizei técnicas analíticas e numéricas para resolver equações diferenciais e sistemas lineares. Desenvolvi algoritmos para o cálculo da solução em série de Taylor de uma equação diferencial. Além disso, tive a oportunidade de ter contato com uma área da física cada vez mais relacionada à computação: a mecânica quântica.

Os modelos que escolhemos para estudar revelam as principais diferenças entre o comportamento de partículas quânticas e clássicas. Observamos interferências quânticas, tunelamento e formação de níveis discretos de energia.

Mostramos como sistemas quânticos simples, podem ser combinados para fornecer sistemas com comportamentos complexos. O sistema de dupla barreira pode ser usado como “sintonizador” de energias eletrônicas. Mostramos ainda como a suavização do potencial leva a importantes alterações na transmissão eletrônica, como o alargamento das ressonâncias de transmissão.

Há várias combinações possíveis para continuação deste trabalho. Uma delas seria combinar várias barreiras triangulares idênticas e estudar a formação de bandas de energia. A outra seria combinar várias barreiras triangulares com parâmetros escolhidos aleatoriamente e estudar o fenômeno de localização eletrônica.

Uma outra possibilidade seria estudar a evolução temporal de um pacote de onda frente a um potencial contínuo e compará-la com o caso descontínuo (retangular). Todas estas linhas são factíveis com as ferramentas utilizadas e desenvolvidas neste trabalho.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

LEITE, Rogério Cezar de Cerqueira; CASTRO, Antonio Rubens Britto de. Física do estado sólido. São Paulo: E. Blucher, 1978.

KITTEL, Charles. Introdução a física do estado sólido. 5. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.

PIZZA, A. F. R. de Toledo. Mecânica Quântica. São Paulo: Editora Da Universidade de São Paulo, 2003.

HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; WALKER, Jearl. Fundamentos da física 4: ótica e física moderna. 4. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1996.

NUSSENZVEIG, H. Moyses. Curso de física básica. 4. ed. São Paulo: E. Blucher, 2002.

EISBERG, R. M. Fundamentos da Física Moderna. Rio de Janeiro: Editora Guanabara, 1979.

COHEN-TANNOUDJI, C., Quantum Mechanics, France: Wiley Interscience, , 1977.

FEYNMAN, LEIGHTON and SANDS, The Feynman Lectures on Physics – Quantum Mechanics, vol.III, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1966.

FRENCH. A. P., An Introduction to Quantum Physics, England: Chapman and Hall, 1993.

METCALF, M. and REID, J., Fortran 90/95 explained, 2<sup>a</sup> edição, New York: Oxford 1999.

SHIVE, J. N., A Física da Eletrônica do Estado Sólido, São Paulo: Edgard Blücher, 1972.

TIPLER, P. A, Física Moderna, 3<sup>a</sup> edição, Rio de Janeiro: LTC Editora, 2001. 515p.

MELO, Hilton Andrade de, BIASI, Ronaldo Sérgio de, Introdução à Física dos Semicondutores, São Paulo: Edgard Blücher, 1975.

MICHAEL, FERENGE JR., LEMON, HARVEY B., STEPHENSON, REGINALD J., Curso de Física Moderna, São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo.

COVRE, Geraldo José, Química Total, volume único, São Paulo: Editora FTD S. A., 2001.

SAMPAIO, José Luiz, Física, volume único, São Paulo: Editora Atual, 2005.

GONÇALVES, Dalton, Física, volume único, 3ª Edição, Rio de Janeiro: Editora Ao Livro S.A., 1968.

UTIMURA, Teruko Y., LINGUANOTO, Maria, Química, volume único, São Paulo: Editora FTD S. Ao, 1998.

CARVALHO, Geraldo Camargo de, Química Moderna, São Paulo: Editora Scipione, 1997.