

RENATO SILVEIRA

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS NANOSCÓPICOS DESORDENADOS

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

Abril - 2006

RENATO SILVEIRA

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS NANOSCÓPICOS DESORDENADOS

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. Dr. Antonio Tavares da Costa Jr.

Lavras

Minas Gerais - Brasil

Abril - 2006

**Ficha Catalográfica preparada pela Divisão de Processos Técnico
da Biblioteca Central da UFLA**

Silveira, Renato

Transporte Eletrônico em Sistemas Nanoscópicos Desordenados. / Renato Silveira. Lavras - Minas Gerais, 2006. 71p : il.

Monografia de Graduação - Universidade Federal de Lavras. Departamento de Ciência da Computação.

1. Transporte Eletrônico. 2. Barreiras 3. Nanofio. I. Silveira, R. II. Universidade Federal de Lavras. III. Transporte Eletrônico em Sistemas Nanoscópicos Desordenados.

RENATO SILVEIRA

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS NANOSCÓPICOS DESORDENADOS

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 27 de abril de 2006

Prof. Dr. Sergio Martins de Souza

Prof. Dr. Iraziet da Cunha Charret

Prof. Dr. José Monserrat Neto

Prof. Dr. Antonio Tavares da Costa Jr.
(Orientador)

Lavras
Minas Gerais - Brasil

Aos meus avós,

Abner e Yone.

Agradecimentos

Agradeço a todas as pessoas que tiveram importância em minha vida durante a graduação.

Agradeço ao professor Antonio T. Costa Jr. pela orientação, dedicação e paciência em me ensinar Física/Matemática e a todo o pessoal do grupo de Física do DEX/UFLA.

Agradeço ao meu pai, minha mãe, minhas irmãs, minha vó, meu vô que me incentivou com seus sábios conselhos e ao meu tio.

Resumo

Este trabalho tem como objetivo analisar os regimes de transporte eletrônico de nanofios condutores unidimensionais na presença de dois tipos de desordem, estrutural e composicional. Descrevemos o nanofio usando um modelo simplificado para sua estrutura eletrônica, onde átomos de diferentes materiais são representados por diferentes valores de energia potencial. A parte desordenada do nanofio é representada, então, por uma seqüência de barreiras de potencial. A condutância do fio está diretamente relacionada ao coeficiente de transmissão de um elétron, que pode ser obtido a partir da solução da equação de Schrödinger do sistema. A análise dos diferentes regimes de transporte é feita através do cálculo da distribuição de coeficientes de transmissão de ensembles de fios. Os resultados mostram a transição entre diferentes regimes de transporte devido à variação de determinados parâmetros do sistema, tais como o grau de desordem e o comprimento da seção desordenada do fio.

Abstract

This work has as objective to analyze regimes of electronic transport of unidimensionals conducting nanowires in the presence of two types of disorder, structural and composicional. We describe the nanowire using a simplified model for its electronic structure, where atoms of different materials are represented by different values of potential energy. The nanowire disordered part is represented, then, for a sequence of potential barriers. The wire conductance is directly related to the transmission coefficient of an electron, which can be obtained from the solution of the system's Schrödinger equation. The different transport regimes analysis is made through the calculation of the transmission coefficients distribution of ensembles of wires. The results shows the transition between different regimes of transport due to variation of system determined parameters, such as the disorder degree and the wire disordered section length.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	O ELÉTRON E SUAS PROPRIEDADES	5
2.1	Introdução	5
2.2	A Natureza Ondulatória do Elétron	6
3	ELEMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	7
3.1	Introdução	7
3.2	Estado quântico de um sistema	8
3.3	Notação de Dirac	8
3.3.1	Representação de <i>Kets</i> e <i>Bras</i>	9
3.4	Postulados da Mecânica Quântica	10
3.5	Equação de Schrödinger	11
4	COMPORTAMENTO DO ELÉTRON EM UM SÓLIDO	15
4.1	Introdução	15
4.2	Transporte Eletrônico	15
5	MODELOS SIMPLIFICADOS PARA NANOFIOS	19
5.1	Introdução	19
5.2	Degrau de Potencial	19
5.3	Barreira de Potencial	23
5.4	Dupla-Barreira de Potencial	27
5.5	Resultados e Discussões do Sistema de Dupla-Barreira	29
5.6	Múltiplas Barreiras de Potencial	32
5.7	Resultados e Discussões do Sistema de Múltiplas Barreiras	38

5.8	Notas de Implementação	42
6	SISTEMAS DESORDENADOS	45
6.1	Introdução	45
6.2	Sistemas de Dupla-Barreira	46
6.2.1	Desordem estrutural	47
6.3	Distribuição de Condutâncias em Sistemas Compostos por Múltiplas Barreiras	51
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	57

Lista de Figuras

1.1	Nanofio. [Ebbesen (1996)]	3
4.1	Representação de um sólido. Parte superior: Modelo clássico de um átomo. os pontos individuais representam os elétrons, enquanto os traços indicam as órbitas. Parte inferior: a nuvem de elétrons vem indicada pelo anel sombreado. Os pontos representam os elétrons de valência. [Shive (1972)].	16
4.2	Diagrama de energia de um elétron em um sólido. [Shive (1972)].	18
5.1	Energia potencial do elétron em função da posição ao longo da direção perpendicular à interface entre os materiais. x_0 marca a posição da interface. Abaixo está uma representação esquemática do sólido composto por uma sequência de átomos A seguidos por uma sequência de átomos B	20
5.2	Barreira de Potencial	23
5.3	Processos possíveis quando uma partícula encontra uma barreira de potencial	25
5.4	Penetração da barreira por uma onda com energia menor que a da barreira. Parte da onda consegue atravessar a barreira, embora, classicamente, a partícula não possa entrar na região $0 < x < a$, na qual a energia potencial é maior que a energia total.	26
5.5	Dupla-barreira de potencial. L é a largura do poço, b é a largura da barreira e V_0 é a altura da barreira.	28
5.6	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia para o modelo com 2 barreiras, distantes entre si 3 unidades de comprimento e com largura de 3 unidades de comprimento. ($E > V$)	30
5.7	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia para o modelo com 2 barreiras, distantes entre si 3 unidades de comprimento e com largura de 3 unidades de comprimento. ($E < V$)	31

5.8	Sistema composto por n-átomos. A cada átomo está associado um potencial.	32
5.9	Barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S_I representa o sistema no qual a partícula está sujeita.	33
5.10	Sistema composto por dupla-barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S_n representam os sistemas nos quais a partícula está sujeita.	34
5.11	Barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S representa um operador relacionado a um único sistema, composto indiretamente dos coeficientes do operador S_I e S_{II}	35
5.12	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 3 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E > V$. Na parte superior à esquerda o modelo é composto por 1 barreira. Na parte superior à direita o modelo é composto por 2 barreiras. Na parte inferior à esquerda o modelo é composto por 5 barreiras. Na parte inferior à direita o modelo é composto por 100 barreiras.	38
5.13	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 3 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E > V$. A curva azul refere-se ao sistema composto por 10 barreiras e a curva vermelha refere-se ao sistema composto por dupla-barreira.	39
5.14	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 1,5 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E < V$. A curva azul refere-se ao sistema composto por 30 barreiras e a curva vermelha refere-se ao sistema composto por dupla-barreira.	40
5.15	Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 1,5 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E < V$. Na parte superior à esquerda o modelo é composto por 5 barreiras. Na parte superior à direita o modelo é composto por 10 barreiras. Na parte inferior à esquerda o modelo é composto por 20 barreiras. Na parte inferior à direita o modelo é composto por 35 barreiras.	41
6.1	Na parte à esquerda tem-se o gráfico da transmitância x largura da barreira de potencial ($T(L)$). Na parte a direita tem-se a derivada da transmitância em relação à largura $\frac{dT(L)}{dL}$. Em ambos os casos $E = 10.9$ unidades de energia.	49

6.2	Distribuições de transmitâncias para variação aleatória da distância entre as barreiras num sistema de dupla-barreira. O <i>ensemble</i> foi composto por 100000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.1$, no segundo $E = 10.2$, no terceiro $E = 10.9$ e no ultimo, $E = 11.0$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).	50
6.3	Média da transmitância em função da quantidade de barreiras que compõem o sistema.	52
6.4	Ajuste para as exponenciais.	53
6.5	Distribuições de transmitâncias para variação estrutural no modelo composto por 30 barreiras. Variações aleatórias da largura e distância entre as barreiras. O <i>ensemble</i> foi composto por 1500000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.99$, no segundo $E = 11.00$, no terceiro $E = 19.10$ e no ultimo, $E = 19.20$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).	54
6.6	Distribuições de transmitâncias para desordem composicional no modelo composto por 30 barreiras. Variações aleatórias da altura das barreiras. O <i>ensemble</i> foi composto por 1500000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.1$, no segundo $E = 10.2$, no terceiro $E = 10.9$ e no ultimo, $E = 11.0$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).	55
6.7	Distribuições de transmitâncias com a mesma média, para desordem composicional e estrutural no modelo composto por 30 barreiras. O <i>ensemble</i> foi composto por 1500000 sistemas. No primeiro quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 19.32$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 14.38$. No segundo quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 18.03$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.65$. No terceiro quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 16.80$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.65$. No quarto quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 16.48$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.53$	56

Lista de Tabelas

6.1	Aproximação das Exponenciais para valores de energia arbitrários	52
-----	----------------------------------------------------------------------------	----

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Os avanços recentes nas técnicas de crescimento e caracterização de materiais têm permitido a fabricação e manipulação de sistemas físicos cada vez menores. Hoje já é possível fabricar e manipular sistemas na escala nanoscópica, ou seja, de alguns nanômetros. Isto significa que o número de átomos envolvidos na fabricação é muito pequeno. Um exemplo extremo desta fabricação são as cadeias atômicas, que são como “fios” de um único átomo de espessura. Este tipo de sistema é comumente chamado de nanofio.

A presença de imperfeições nessas estruturas, seja estrutural ou composicional, gera espalhamento das ondas eletrônicas, que dá origem à resistência elétrica. A desordem pode fazer com que as ondas eletrônicas percam completamente seu caráter estendido, tornando-se localizadas, e transformando o que seria um metal num isolante. Este fenômeno é muito rico, e tem implicações tecnológicas importantes, principalmente para dispositivos de dimensões reduzidas, já que as características da transição metal-isolante decorrente do fenômeno são fundamentalmente afetadas pela dimensionalidade do sistema. Sob determinadas condições, a função de onda eletrônica pode ser deslocalizada, ou seja, estendida através de toda a extensão da rede cristalina. É este comportamento que dá origem ao “mar de elétrons” que caracteriza um condutor, ou metal. É ainda esta mesma propriedade que garante que numa rede cristalina perfeita os elétrons movem-se sem qualquer tipo de resistência, ou seja, uma rede cristalina perfeita pode ser um condutor perfeito.

Em 1991, Sumio Iijima demonstrou a existência de uma família de formas elementares de carbono, ficando então conhecida como nanotubos. O nome nanotubo tem origem no fato de esses objetos serem estruturas tubulares com diâmetros da ordem de um nanômetro (nm), ou seja, um milionésimo de milímetro. Seriam necessários milhares de nanotubos colocados lado a lado para se atingir a espessura de um fio de cabelo. Tendo diâmetros muito menores que o comprimento de onda da luz visível, os nanotubos são individualmente invisíveis, mesmo se observados através do mais potente microscópio óptico. Para serem visualizados individualmente, torna-se necessário o uso de microscópios eletrônicos [Ebbesen (1996)].

Os nanotubos possuem algumas características especiais, tais como resistência à tração e alta condutividade elétrica. A alta resistência à tração (quantificada pelo módulo de Young, muito maior do que na maioria dos materiais tradicionais) deve-se ao alto ordenamento da rede cristalina do nanotubo. Desta forma, as ligações químicas entre os átomos de Carbono atuam cooperativamente, resultando em uma enorme resistência mecânica. A alta condutividade de alguns nanotubos também se deve à rede cristalina perfeitamente ordenada. Nanotubos de carbono são bons exemplos de condutores balísticos: os elétrons podem atravessar todo o nanotubo sem sofrer espalhamento.

Algumas formas de nanotubos já estão sendo usadas em protótipos de produtos comerciais, enquanto outras são mais caras e difíceis de serem produzidas e seu uso é ainda restrito a pesquisa básica.

Há vários dispositivos nos quais os nanotubos podem ser usados:

- componentes eletrônicos (transistores e diodos);
- sensores de gás;
- pinças minúsculas;
- emissores de elétrons em lâmpadas frias;
- pontas de microscópios eletrônicos para observação e manipulação de moléculas;
- materiais superfortes;
- nanofios.

Embora alguns desses dispositivos sejam, atualmente, apenas protótipos, é certo seu uso em produtos comerciais em um futuro próximo.

Um das possibilidades de aplicação dos nanotubos envolve o uso dessas moléculas como nanofios, que, combinados em sua rica variedade (metais ou semicondutores), poderiam ser usados para construir dispositivos eletrônicos distintos dos atuais (baseados no silício) [Ebbesen (1996)]. Para isso, é essencial entender os mecanismos de transporte eletrônico dessas moléculas.

Pretende-se nesse trabalho caracterizar os regimes de transporte eletrônico de nanofios condutores unidimensionais, na presença de dois tipos de desordem, estrutural e composicional. O nanofio será descrito usando um modelo físico simplificado para sua estrutura eletrônica, onde átomos de diferentes materiais são representados por diferentes valores de energia potencial. Um modelo físico é um sistema simplificado e idealizado para representar fatos reais. Através destes modelos pode-se observar muitas características que poderiam ser observadas na situação real.

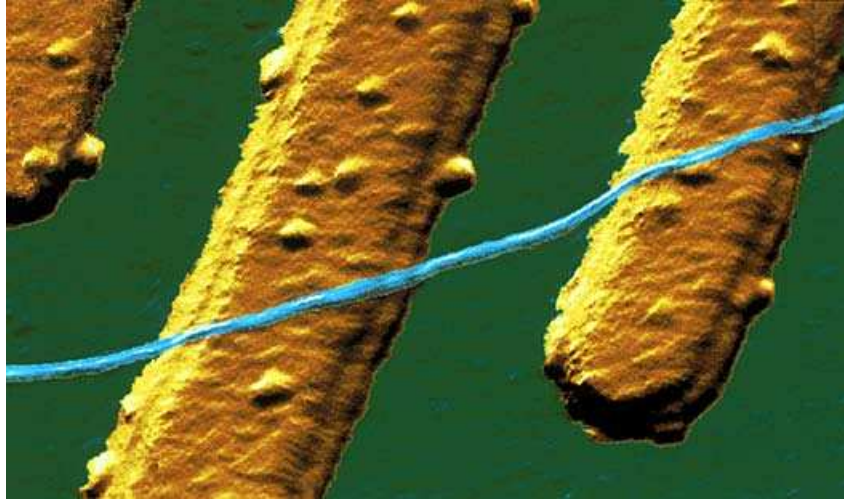


Figura 1.1: Nanofio. [Ebbesen (1996)]

A parte desordenada do nanofio será representada, então, por uma sequência de barreiras de potencial. Será analisado como se dá o transporte eletrônico nessa estrutura. A caracterização dos diferentes regimes de transporte é feita através do cálculo da distribuição de coeficientes de transmissão de *ensembles* de fios. A seguir, está apresentado um breve roteiro dos assuntos abordados nas próximas seções.

- Capítulo 2: O Elétron e Suas Propriedades
Apresenta algumas propriedades dos elétrons, que servirá como introdução para o estudo da Mecânica Quântica.
- Capítulo 3: Elementos da Mecânica Quântica
Introduz a Mecânica Quântica e seus postulados, e aprofunda o estudo da equação de Schrödinger.
- Capítulo 4: Comportamento do Elétron em um Sólido
Discute como o elétron se comporta em um sólido e como se dá o transporte eletrônico.
- Capítulo 5: Modelo Simplificado para Nanofios
Explica a metodologia adotada para modelagem de nanofios e discute os resultados obtidos com esses modelos.
- Capítulo 6: Sistemas Desordenados
Apresenta como foi feita a distribuição de condutâncias, discute os resultados e caracteriza os sistemas através a distribuição de valores de condutância.

- Capítulo 7: Considerações Finais

Conclui o trabalho, ressaltando os resultados mais importantes e apresentando sugestões de novos trabalhos.

Capítulo 2

O ELÉTRON E SUAS PROPRIEDADES

2.1 Introdução

O entendimento de muitas propriedades da matéria só se tornou possível quando o elétron foi reconhecido como uma das partículas fundamentais da matéria e, posteriormente, quando descobriu-se sua natureza quântica. Somente com o estudo aprofundado do elétron é que foi possível o desenvolvimento dos modernos componentes eletrônicos, tais como transistores e díodos.

Para entender como o elétron entra na composição da matéria, precisa-se de um modelo atômico. O modelo atômico aceito atualmente, cuja validade foi comprovada por uma infinidade de experimentos, descreve o átomo formado por um núcleo, muito concentrado espacialmente, onde agrupam-se prótons e nêutrons, e a eletrosfera, uma “nuvem” difusa formada pelos elétrons em movimento.

É comum fazer-se uma analogia com algo semelhante a um sistema solar em miniatura, onde as cargas positivas de um núcleo central sejam contrabalanceadas pelas cargas negativas dos elétrons que se encontram em movimento de rotação em torno do núcleo, em órbitas de vários tamanhos e percursos. Essa analogia, entretanto, está muito longe do comportamento real do átomo. As partículas que compõem o átomo não podem ser descritas pela mecânica clássica. Assim, o conceito de “trajetória” ou “órbita” não cabe na sua descrição. Como pode ser visto adiante, estes conceitos devem ser substituídos pelo de função de onda, que dá origem aos orbitais atômicos, base da descrição moderna do átomo.

O elétron então pode ser visto como uma partícula submicroscópica de matéria, possuindo massa e carga elétrica. Não faz sentido definir o tamanho ou o formato do elétron, pois o elétron é uma partícula pontual, sem estrutura interna. Admite-se que a partícula tem formato esférico.

Essa representação do elétron é aceitável para muitos casos. Por outro lado, numerosas experiências com elétrons levam a concluir que esse modelo é totalmente insatisfatório.

2.2 A Natureza Ondulatória do Elétron

Experiências feitas com feixes de elétrons produziram resultados inesperados, que só puderam ser explicados admitindo que o fluxo de elétrons tem o comportamento às vezes de um jato de partículas materiais, às vezes de onda plana com frente de onda perpendicular à direção do movimento do elétron. Essas experiências indicaram que os elétrons, sob certas condições, comportam-se como ondas e conduziram a uma nova descrição do elétron.

Nesse contexto, surge a Mecânica Quântica. O fato de os elétrons se comportarem, às vezes como partículas, e às vezes como ondas, reforça uma dualidade de interpretação e modo de raciocinar. A Mecânica Quântica adquire assim, uma importância significativa na análise do comportamento do elétron, uma vez que a maioria dos processos atômicos e eletrônicos é melhor explicada em termos de ondas que de acordo com a mecânica clássica de Newton [Shive (1972)].

Capítulo 3

ELEMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

3.1 Introdução

Na década de 1920 surgiu na física uma teoria que viria a se tornar a base de quase todo o nosso conhecimento da estrutura da matéria: a Mecânica Quântica. A Mecânica Quântica é a parte da física que estuda o comportamento de sistemas subatômicos. Esses sistemas com dimensões na escala dos Angstroms ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) sofrem a influência de efeitos quânticos, como a impossibilidade de determinar ao mesmo tempo sua posição e sua velocidade [Nussenzveig (2002)].

Na Mecânica Quântica, diferente da Mecânica Clássica, não existe o conceito de trajetória. Ao invés da trajetória, o movimento das partículas é descrito por meio de uma função de onda, que é uma função da posição da partícula e do tempo. A função de onda é interpretada como uma medida da probabilidade de se encontrar a partícula em determinada posição em determinado tempo. Para descrever a dinâmica de um sistema quântico deve-se, portanto, achar sua função de onda, e, para este efeito, usam-se as equações de movimento, propostas por Werner Heisenberg e Erwin Schrödinger, independentemente.

Pode-se citar alguns exemplos de grandes sucessos de aplicações da Mecânica Quântica, como a descrição do comportamento para os semicondutores, que são a base da tecnologia dos chips dos computadores atuais e também para os supercondutores, materiais que conduzem corrente elétrica sem dissipação de energia, e ainda a compreensão da estrutura do núcleo atômico que possibilitou o uso da energia nuclear em diversas aplicações [Tipler (2001)].

3.2 Estado quântico de um sistema

Um estado de um sistema clássico (regido pela Mecânica Newtoniana) é caracterizado por valores bem definidos das grandezas físicas mensuráveis. Posição, velocidade e energia têm valores bem definidos a todo instante. Na mecânica quântica, determinar o estado de um sistema quântico corresponde a especificar probabilidades de encontrar determinados valores para as grandezas físicas mensuráveis [Cohen (1997)]. É como se esse sistema pudesse estar, ao mesmo tempo, em diversos estados clássicos diferentes, devido a uma incerteza intrínseca ao sistema.

Devido a isso, o estado de uma partícula é representado, matematicamente, por um vetor num espaço das funções de ondas, o qual é um espaço vetorial complexo de dimensão infinita de funções contínuas de quadrado integrável, com estrutura de um espaço de Hilbert. O vetor de estado recebe esse nome devido à forte analogia entre suas propriedades e as propriedades de um vetor geométrico de tamanho unitário (vetor unitário) [French (1993)].

Para representar esses vetores de estado, será utilizada a notação de Dirac.

3.3 Notação de Dirac

Vetores de estado são, usualmente, escritos usando uma notação especial introduzida pelo físico britânico Paul Dirac, a notação *braket*. Nessa notação, um vetor de estado é chamado de um *ket* representado pelo símbolo $|\ \rangle$, dentro do qual é colocado um símbolo que permite distinguir um *ket* dos outros. Por exemplo: o símbolo ψ dentro do símbolo $|\ \rangle$, torna-se o vetor *ket* $|\psi\rangle$. $|\psi\rangle$ representa então um sistema no estado ψ .

Em particular, seja \mathcal{F} o espaço das funções de ondas e $\psi(\mathbf{r})$ uma função pertencente a esse estado, pode-se associar a cada função $\psi(\mathbf{r})$ vetores de estado $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço dos vetores de estados $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ [Cohen (1997)].

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{F} \iff |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$$

A dependência em \mathbf{r} não aparece em $|\psi\rangle$. Somente a letra ψ aparece para identificar qual função está associada. $\psi(\mathbf{r})$ será interpretada como o conjunto de componentes do *ket* $|\psi\rangle$ em uma base particular e \mathbf{r} faz o papel de um índice.

Qualquer vetor do espaço dual do espaço dos *ket* é chamado de *bra*. É representado pelo símbolo $\langle \ |$, dentro do qual é colocado um símbolo que permite distinguir um *bra* dos outros. Como exemplo, o *bra* $\langle \chi|$ representa um funcional linear χ e pode-se usar a notação $\langle \chi|\psi\rangle$ para denotar um número complexo obtido ao aplicar o funcional linear $\langle \chi|$ ao *ket* $|\psi\rangle$:

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle \chi | \psi \rangle$$

O número complexo $\langle \chi | \psi \rangle$ é o produto escalar entre o *ket* $|\psi\rangle$ com o *ket* $|\chi\rangle$ correspondente a $\langle \chi |$.

Ao saber $|\psi\rangle$ sabe-se tudo sobre o sistema, e se tiver o conhecimento de $\langle \chi | \psi \rangle$ é possível calcular todas as propriedades do sistema.

Um par *bra-ket* também pode ser visto como a projeção do conteúdo do *ket* no conteúdo do *bra*, ou, a "sombra" que o *ket* faz sobre o *bra*. Por exemplo, $\langle \phi | \psi \rangle$ é a projeção do estado $|\psi\rangle$ no estado $\langle \phi |$. É a amplitude que um sistema no estado $|\psi\rangle$ irá encontrar no estado $\langle \phi |$ [Cohen (1997)].

Um *bra* $\langle \psi | = |\psi\rangle^*$, onde $|\psi\rangle^*$ é o complexo conjugado de $|\psi\rangle$.

O número complexo $\langle \chi | \psi \rangle$ é definido como sendo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x)\psi(x) dx$$

Ao escrever algum número $\langle \chi | \psi \rangle$ na ordem oposta, tem-se um operador $|\chi\rangle\langle \psi |$. Como $\langle \chi | \psi \rangle$ é um número complexo, $|\chi\rangle\langle \psi | \phi \rangle$ é um *ket* obtido ao multiplicar $|\chi\rangle$ pelo escalar $\langle \psi | \phi \rangle$. O resultado do operador $|\chi\rangle\langle \psi |$ aplicado a um *ket* arbitrário é um outro *ket*.

3.3.1 Representação de *Kets* e *Bras*

Kets podem ser representados na forma de uma matriz coluna:

$$|\psi\rangle_a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Bras podem ser representados na forma de uma matriz linha:

$$\langle \psi |_a = \left(a_0^* \quad a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_i^* \quad \cdots \right)$$

Como $\langle \psi_a | \psi_b \rangle$ é um número complexo:

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \begin{pmatrix} a_0^* & a_1^* & a_2^* & \cdots & a_i^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_i \\ \vdots \end{pmatrix} = a_0^* b_0 + a_1^* b_1 + \cdots$$

Operadores podem ser representados na forma de matrizes:

$$|\psi_a\rangle\langle\psi_b| = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0^* & b_1^* & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 b_0^* & a_0 b_1^* & \cdots \\ a_1 b_0^* & a_1 b_1^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

3.4 Postulados da Mecânica Quântica

A descrição quântica dos sistemas físicos motivados experimentalmente é baseada a alguns postulados.

Postulado 1: Em um determinado tempo t_0 , o estado de um sistema físico é definido especificando um *ket* $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente ao espaço de estados \mathcal{E} .

Postulado 2: Cada grandeza física mensurável \mathcal{A} é descrita por um operador \mathbf{A} atuando nos elementos do espaço \mathcal{E} . Esse operador é um observável.

Postulado 3: O único resultado possível da medida de uma grandeza física \mathcal{A} é um dos autovalores do observável correspondente \mathbf{A} .

Postulado 4 (caso de um espectro discreto não-degenerado): Quando uma grandeza física \mathcal{A} é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $P(a_n)$ de obter um não-degenerado autovalor a_n do observável correspondente \mathbf{A} é:

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

onde $|u_n\rangle$ é um autovetor normalizado de \mathbf{A} associado com o autovalor a_n de \mathbf{A} .

Postulado 4 (caso de um espectro discreto): Quando uma grandeza física \mathcal{A} é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $P(a_n)$ de obter um autovalor a_n do observável correspondente \mathbf{A} é:

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$$

onde g_n é o grau de degeneração de a_n e $\{|u_n^i\rangle\}$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$) é um conjunto ortonormal de vetores que formam uma base no auto-subespaço \mathcal{E}_n associado com o autovalor a_n de \mathbf{A} .

Postulado 4 (caso de um espectro não-degenerado contínuo): Quando uma grandeza física \mathcal{A} é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $dP(\alpha)$ de obter um resultado entre α e $\alpha + d\alpha$ é:

$$dP(\alpha) = |\langle \nu_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$$

onde $\langle \nu_\alpha |$ é o autovetor correspondente ao autovalor α do observável \mathbf{A} associado com \mathcal{A} .

Postulado 5: Se a medida de uma grandeza física \mathcal{A} em um sistema no estado $|\psi\rangle$ dá a_n como resultado, o estado do sistema, imediatamente após a medida, é a projeção normalizada, $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$, de $|\psi\rangle$ no auto-espaço associado com a_n .

Postulado 6: A evolução temporal do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ é governada pela Equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

onde H é o observável associado com a energia total do sistema.

3.5 Equação de Schrödinger

A equação de onda que governa o movimento dos elétrons e outras partículas foi proposta por Schrödinger no final de 1925, e hoje é conhecida como equação de Schrödinger. Essa equação não pode ser demonstrada, assim como não é possível demonstrar as leis de Newton [Tipler (2001)]. Sua validade está na concordância com os resultados experimentais. Em uma notação mais usual, a equação de Schrödinger em uma dimensão tem a seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.1)$$

As soluções desta equação são denominadas funções de onda. Esta equação diz como calcular amplitudes quânticas (distribuição de probabilidade) como uma função da posição e tempo para partículas em um dado ambiente como o interior de um átomo. Apesar dessa equação não poder ser demonstrada, pode-se ver que a equação é plausível.

Na mecânica clássica, a energia E de uma partícula é a soma de sua energia cinética e potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (3.2)$$

onde $\frac{p^2}{2m}$ é a energia cinética, V a energia potencial, p o momento linear e m a massa da partícula.

A Equação 3.2 também pode ser escrita da seguinte forma:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \quad (3.3)$$

Toda equação de onda deve relacionar corretamente a energia de uma partícula e seu momento linear. A equação 3.1 é satisfeita por uma função de onda harmônica no caso especial de uma partícula livre, isto é, sobre a qual não age nenhuma força e para a qual a energia potencial é constante: $V(x, t) = V_0$. Uma onda plana $\cos(kx - \omega t)$ não satisfaz a equação 3.1 porque a diferenciação em relação ao tempo transforma o \cos em \sin , mas a segunda derivada em relação a x produz um \cos . A função \sin também não pode ser uma solução pelo mesmo motivo [French (1993)]. Entretanto, a forma exponencial da função de onda harmônica satisfaz a equação 3.1:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega t)} \\ &= A[\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)] \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde A é uma constante. Nesse caso,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= (ik)^2 Ae^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \Psi \end{aligned}$$

Substituindo estas derivadas na equação 3.1 e fazendo $V(x, t) = V_0$ tem-se que:

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

ou

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

que é a equação 3.3.

Uma diferença importante entre a equação de Schrödinger e a equação de onda clássica está no fato de o número imaginário $i = \sqrt{-1}$ aparecer explicitamente na equação de Schrödinger. As funções de onda que satisfazem a equação de Schrödinger não são necessariamente reais, como pode ser visto no caso da função de onda de uma partícula livre (Equação 3.4). Isso significa que a função de onda $\Psi(x, t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger não é uma função diretamente mensurável como a função de onda clássica, já que os resultados de medições são necessariamente números reais. Entretanto, a possibilidade de encontrar um elétron no intervalo entre x e $x + dx$ certamente pode ser determinada, assim como pode-se determinar a

probabilidade de o resultado de uma jogada de cara-ou-coroa ser cara [Feynman (1997)]. A probabilidade $P(x)dx$ de o elétron ser encontrado no intervalo entre x e $x + dx$ é definida como sendo $|\Psi|^2 dx$. Esta interpretação probabilística de Ψ foi proposta por Max Born e reconhecida como a forma mais apropriada de relacionar as soluções da equação de Schrödinger aos resultados das medições. A probabilidade de um elétron estar no intervalo dx , um número real, pode ser medida verificando a fração do tempo que a partícula é encontrada nesta região em uma série muito grande de situações idênticas. De acordo com a interpretação de Born tem-se que:

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

onde Ψ^* , o complexo conjugado de Ψ , é obtido substituindo i por $-i$ na função Ψ . A natureza complexa de Ψ serve para enfatizar o fato de que é inútil tentar responder às perguntas: “O que está oscilando em uma onda de matéria?” e “Em que tipo de meio as ondas de matéria se propagam?” [Tipler (2001)]. A função de onda não passa de um artifício matemático. O que tem um significado real é o produto $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$, que representa uma distribuição de probabilidade $P(x, t)$, ou, como também é frequentemente chamado, uma densidade de probabilidade. Para manter a analogia com as ondas e funções de ondas clássicas, $\Psi(x, t)$ é às vezes chamada de amplitude de densidade de probabilidade ou simplesmente amplitude de probabilidade.

A probabilidade de um elétron ser encontrado no intervalo x_1 e $x_1 + dx$ ou no intervalo x_2 e $x_2 + dx$ 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 [French (1993)]. Assim, tem-se que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = 1 \quad (3.5)$$

A Equação 3.5 é conhecida como condição de normalização.

Quando a energia potencial não varia com o tempo, as funções do tempo e do espaço podem ser separadas, o que permite escrever a equação de Schrödinger em uma forma muito mais simples. Para isso, escreve-se $\Psi(x, t)$ como um produto de uma função apenas de x por uma função apenas de t :

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (3.6)$$

Substituindo Ψ pela função 3.6 na equação 3.1 tem-se:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)\phi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) &= i\hbar \frac{\partial \psi(x)\phi(t)}{\partial t} \\ &\text{ou} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) &= i\hbar \psi(x) \frac{d\phi(t)}{dt} \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde as derivadas agora são ordinárias e não parciais. Dividindo a Equação 3.7 por $\psi(x)\phi(t)$, obtém-se:

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

O lado esquerdo da equação acima é função apenas de x e o lado direito é função apenas de t . Assim, os dois lados dessa equação devem ser iguais à mesma constante C , conhecida como constante de separação. Com isso, substitui-se uma equação diferencial parcial contendo duas variáveis independentes por duas equações diferenciais ordinárias que contêm apenas uma variável independente cada uma:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) &= C \\ i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} &= C \end{aligned}$$

É fácil mostrar que C deve ser igual a E (energia total da partícula). Desde que V não tenha dependência temporal a solução da equação independente do tempo será sempre $\psi(t) = e^{-iEt/\hbar}$.

A equação de Schrödinger independente do tempo tem então a forma:

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

É propriedade matemática da equação de Schrödinger que $\psi(x)$ satisfaça algumas condições:

1. $\psi(x)$ e $\frac{d\psi}{dx}$ devem existir e ser contínuas;
2. $\psi(x)$ e $\frac{d\psi}{dx}$ devem ser finitas;
3. $\psi(x)$ e $\frac{d\psi}{dx}$ devem ser unívocas;
4. $\psi(x)$ deve tender a zero com suficiente rapidez, quando $x \rightarrow \pm\infty$.

Capítulo 4

COMPORTAMENTO DO ELÉTRON EM UM SÓLIDO

4.1 Introdução

É importante ter uma boa descrição de como o elétron se comporta em um sólido para entender as propriedades da matéria, inclusive o transporte eletrônico. Antes, porém, precisa-se de um modelo físico para descrever o sólido e a propagação do elétron.

Os modelos físicos são instrumentos que permitem representar um problema de forma simplificada. Tais modelos estabelecem, por exemplo, as simplificações, os vínculos e as restrições necessárias ou as estruturas internas, mesmo que não sejam diretamente observadas. Em um modelo físico, pode-se reduzir os fenômenos a entes ideais e trabalhar com essa realidade simplificada e idealizada, mantendo-se assim, características importantes do sistema modelado.

4.2 Transporte Eletrônico

Pode-se pensar em um sólido cristalino como sendo um sistema composto por um arranjo periódico de átomos [Kittel (1996)]. Uma representação esquemática deste modelo pode ser visto na parte inferior da Figura 4.1. Cada átomo desse sólido possui um núcleo contendo a maior parte de sua massa e é dotado de uma carga elétrica. A carga é equilibrada por uma nuvem de elétrons que movem-se ao seu redor. Dos elétrons que estão em órbita, a maioria está ligada de modo relativamente forte ao núcleo, movendo-se bem próximo a ele quando comparado com as dimensões do átomo inteiro. Essa é uma nuvem interna de elétrons, ou, como costuma ser chamado, o “caroço”. Os elétrons da última camada são aqueles de interesse, porque seu

comportamento determina a maior parte das propriedades físicas, químicas e óticas do sólido. É devido ao fato de os elétrons das últimas camadas do átomo serem os responsáveis pelas propriedades químicas de valência dos materiais que são conhecidos como elétrons de valência [Shive (1972)].

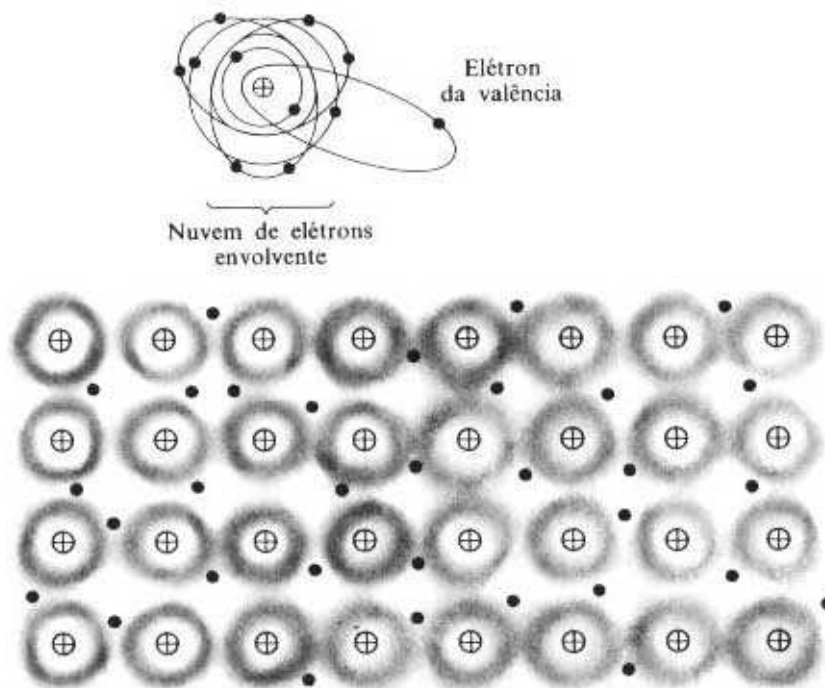


Figura 4.1: Representação de um sólido. Parte superior: Modelo clássico de um átomo. os pontos individuais representam os elétrons, enquanto os traços indicam as órbitas. Parte inferior: a nuvem de elétrons vem indicada pelo anel sombreado. Os pontos representam os elétrons de valência. [Shive (1972)].

Em um sólido, um grande número desses átomos estão reunidos e condensados e seus núcleos atômicos irão se dispor em figuras e arranjos tridimensionais, composto de fileiras, colunas e planos, numa distribuição regular e periódica [Kittel (1996)]. Os orbitais dos elétrons de valência pertencentes a átomos vizinhos irão interpenetrar uns aos outros nesse arranjo, de modo que se torna impossível distinguir o átomos de origem desses elétrons. No caso dos metais, os elétrons de valência são separados do seu átomo original e estão assim livres para se deslocarem através do sólido. O arranjo dos núcleos atômicos é mantido unido pela ação de forças eletrostáticas resultantes, conjuntamente com a nuvem de elétrons de valência que se desloca na estrutura.

Como os diâmetros dos núcleos atômicos são da ordem de 10^{-15} m, enquanto o diâmetro da órbita de um elétron é aproximadamente da ordem de 10^{-10} m, resulta que a parte interna desse sólido tem mais de 99,9% do seu espaço vazio [Kittel (1996)]. Esses elétrons de valência não podem se deslocar além da super-

fície externa do sólido; isso acontece apenas quando quantidades de energia excepcionais, como elevação da temperatura ou radiação luminosa, são aplicadas à estes elétrons.

Embora os tamanhos do núcleo e dos elétrons da nuvem interna sejam tão reduzidos de modo a não interferirem no livre movimento dos elétrons de valência, o amplo espaço vazio é preenchido com um intenso campo elétrico e magnético produzido pelos íons da rede (que são os átomos que formam a rede menos os próprios elétrons de valência) [Neil (1976)].

Cada elétron de valência move-se neste campo eletromagnético. Num sólido cristalino este potencial é periódico, ou seja, é o mesmo em torno de qualquer sítio da rede. O movimento dos elétrons de valência é determinado, portanto, pelas soluções da equação de Schrödinger para o potencial periódico produzido pelos íons da rede. Estas soluções têm duas características fundamentais para que se entenda o comportamento dos elétrons em um sólido: as funções de onda são periódicas, formadas pelo produto de uma onda plana por uma função com a periodicidade da rede cristalina (este é o conteúdo do teorema de Bloch); os níveis de energia permitidos formam “bandas” contínuas separadas por intervalos onde não há valores permitidos de energia (chamados “gaps¹” de energia), como pode ser visto na Figura 4.2. O fato de que as funções de onda são periódicas significa que um elétron num dado autoestado do Hamiltoniano do sólido tem a mesma probabilidade de ser encontrado em qualquer um dos íons da rede. A existência de bandas de energia permitidas separadas por intervalos de energias proibidas dá origem a três tipos de comportamentos, no que diz respeito às propriedades de transporte eletrônico: isolante, metálico e semicondutor.

Os autoestados do Hamiltoniano do sólido são chamado de estados de uma partícula. O número de elétrons no sólido, entretanto, é enorme: proporcional ao número de íons da rede. Na aproximação de elétrons independentes (ou seja, desprezando-se a interação entre os elétrons), o estado conjunto de todos os elétrons do sólido corresponde ao preenchimento dos níveis de energia permitidos um a um, até que todos os elétrons de valência estejam “acomodados”. Este preenchimento deve levar em conta o fato de que os elétrons são férmions: partículas de spin semi-inteiro, que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli. Este princípio diz que dois férmions não podem ocupar estados quânticos idênticos simultaneamente. Sendo assim, apenas dois elétrons podem ocupar o mesmo nível de energia: um com spin $+1/2$, outro com spin $-1/2$.

O sólido se comporta como um isolante se as camadas de energia permitidas estão inteiramente preenchidas ou vazias. Quando uma ou mais camadas estão parcialmente preenchidas, o sólido é um condutor. O sólido é um semicondutor quando as camadas são normalmente preenchidas, mas a zona proibida é suficiente próxima para permitir um deslocamento de elétrons da camada mais preenchida para aquela mais afastada [Kittel (1996)].

¹Do inglês *gap*=intervalo

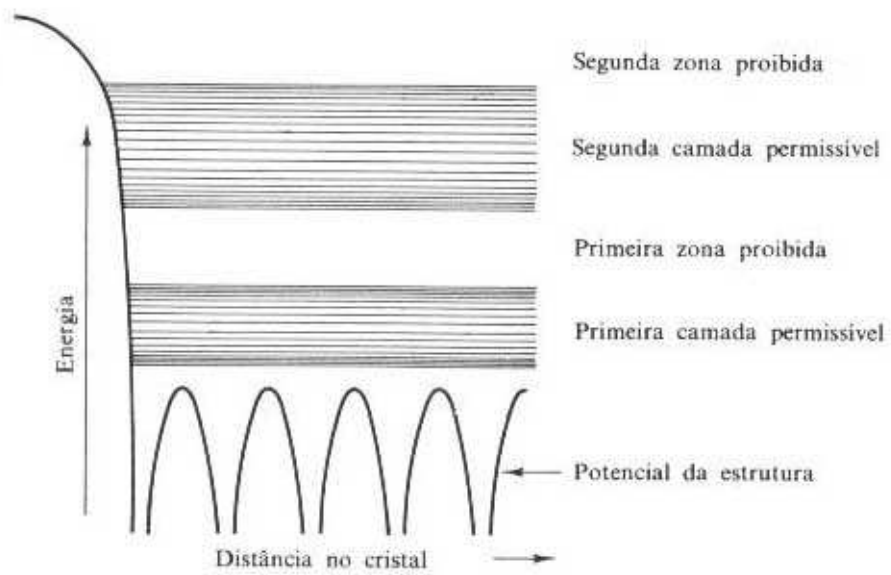


Figura 4.2: Diagrama de energia de um elétron em um sólido. [Shive (1972)].

Capítulo 5

MODELOS SIMPLIFICADOS PARA NANOFIOS

5.1 Introdução

A descrição quântica completa de um nanofio é uma tarefa muito complexa e árdua. Como visto anteriormente, os elétrons de um sólido estão sujeitos a um potencial periódico cuja forma detalhada é complicada. Pode-se, entretanto, construir um modelo simplificado para a propagação dos elétrons substituindo-se o potencial gerado pelos átomos por potenciais constantes por partes. Esta substituição justifica-se quando deseja-se descrever a propagação eletrônica apenas qualitativamente. Ela é muito utilizada em semicondutores com poucos elétrons na banda de condução. Neste caso, os vetores de onda associados aos elétrons de condução são muito pequenos, logo seu comprimento de onda é muito grande. Uma onda eletrônica cujo período espacial é muito maior do que as variações do potencial tem sua propagação muito pouco afetada por estas variações. Neste capítulo serão descritos modelos baseados em potenciais constantes por partes e as soluções da equação de Schrödinger correspondente a cada um deles.

5.2 Degrau de Potencial

Considere um sistema composto por dois diferentes tipos de átomos, A e B . Um elétron nas vizinhanças de cada um desses átomos está sujeito, segundo este modelo, a um potencial essencialmente constante, mas diferente em cada átomo, V_a e V_b . Imagine um sólido composto por uma sequência de átomos A , seguido por uma sequência de átomos B , como na figura 5.1 .

Um elétron que se propague na direção perpendicular à interface entre as regiões A e B “perceberá” uma

variação brusca de potencial. Pode-se representar graficamente, usando-se o modelo de potenciais constantes por partes, o potencial em função da posição relativa à interface, ao longo da linha perpendicular a ela, conforme mostrado na Figura 5.1.

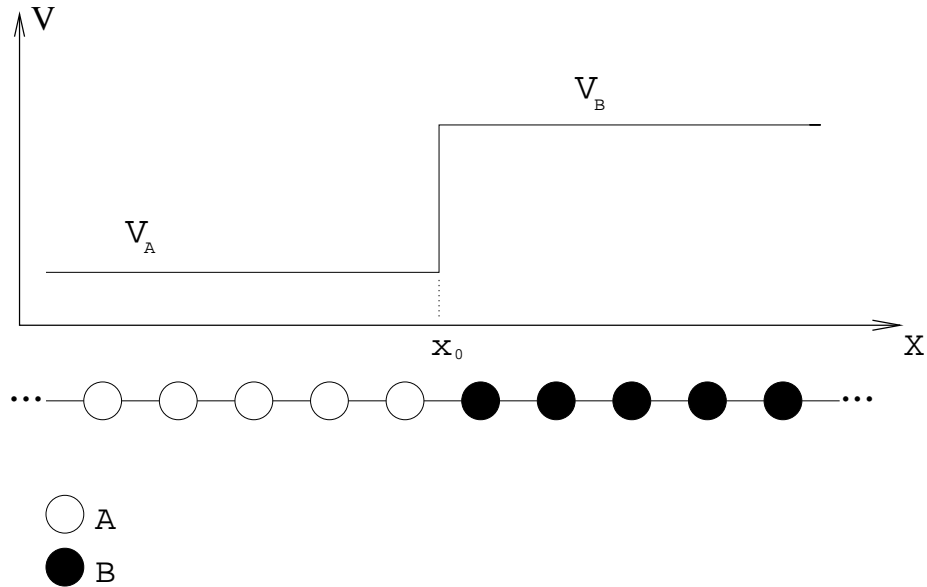


Figura 5.1: Energia potencial do elétron em função da posição ao longo da direção perpendicular à interface entre os materiais. x_0 marca a posição da interface. Abaixo está uma representação esquemática do sólido composto por uma sequência de átomos A seguidos por uma sequência de átomos B .

Esse potencial pode ser descrito matematicamente como uma função degrau:

$$V(x) = V_a \text{ para } x < x_0$$

$$V(x) = V_b \text{ para } x > x_0$$

Pretende-se saber o que acontece quando um elétron de energia total E , que esteja se movendo da esquerda para a direita, encontra o degrau de potencial. A resposta clássica é simples. Para $x < x_0$, a partícula está se movendo com uma determinada velocidade. Em $x = x_0$, é submetida a uma força impulsiva, contrária à velocidade. Se a energia total E é maior que V_b , a partícula continua a se mover para a direita, mas com uma velocidade menor. Este problema clássico corresponde ao de uma bola de massa m que está rolando em uma superfície plana e encontra uma rampa muito abrupta [Tipler (2001)]. Se a energia cinética inicial da bola é menor que V_b , a bola sobe parcialmente a rampa e depois rola de volta para a esquerda, chegando à superfície plana com uma velocidade igual a inicial. Se a energia cinética inicial é maior que V_b , a bola chega ao alto da rampa e continua a rolar para a direita com menor velocidade.

O resultado da mecânica quântica é semelhante ao resultado clássico para $E < V_b$, mas bem diferente para $E > V_b$, como será visto em seguida. A equação de Schrödinger independente do tempo nas duas regiões do espaço com potencial V_a e V_b é dada por:

- **Região I** com potencial V_a ($x < x_0$):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_I^2\psi(x)$$

onde $k_I = \sqrt{\frac{2m(E-V_a)}{\hbar}}$.

- **Região II** com potencial V_b ($x > x_0$):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k_{II}^2\psi(x)$$

onde $k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E-V_b)}{\hbar}}$.

As soluções gerais das equações acima são:

- **Região I:**

$$\psi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \quad (5.1)$$

- **Região II:**

$$\psi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x} \quad (5.2)$$

Ao escrever a solução na região II fez-se a hipótese de que as partículas incidem sobre a barreira da esquerda para a direita. Assim, só há, depois da barreira, componente da função de onda com momento linear positivo. Pode-se, então, interpretar o primeiro termo da função ψ_I como representando o feixe original, já que multiplicando $A_I e^{ik_I x}$ pela parte temporal de $\Psi(x, t)$, $e^{-i\omega t}$, obtém-se uma onda plana se movendo para a direita. O segundo termo, $B_I e^{-ik_I x}$ representa partículas se movendo para a esquerda na região I. Este termo representa a possibilidade de reflexão das partículas pela barreira. Os coeficientes B_I e A_{II} podem ser calculados em função de A_I utilizando as condições do contorno do problema: aplica-se a condição de continuidade às funções $\psi(x)$ e $\frac{d\psi(x)}{dx}$ em $x = x_0$, exigindo que $\psi_I(x_0) = \psi_{II}(x_0)$ e $\frac{d\psi_I(x_0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(x_0)}{dx}$. Isto resulta num sistema algébrico linear com duas equações e três incógnitas. O sistema é, portanto, subdeterminado. A solução deste sistema pode ser escrita de forma a fornecer os outros coeficientes em função de

A_I . Isto pode parecer uma dificuldade matemática, mas tem uma interpretação física interessante: o coeficiente A_I representa a intensidade do feixe incidente, que é arbitrária. As intensidades dos feixes refletido e transmitido são funções da intensidade do feixe incidente, como era de se esperar.

É útil definir os coeficientes de reflexão (R) e transmissão (T) para o sistema em questão. Estes coeficientes representam as razões entre as intensidades dos feixes refletido e transmitido e a intensidade do feixe incidente,

$$R = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 = \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right)^2 \quad (5.3)$$

$$T = \left| \frac{A_{II}}{A_I} \right|^2 = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2} \quad (5.4)$$

Note que esta interpretação em termos de intensidades de feixes tem origem na interpretação probabilística da mecânica quântica: o módulo quadrado da função de onda fornece a probabilidade de encontrar a partícula numa certa região do espaço. Assim, neste caso, $|B_I|^2$ é proporcional à probabilidade de que a partícula seja refletida, e $|A_{II}|^2$ é proporcional à probabilidade de que ela seja transmitida. Sendo assim, é natural esperar que

$$T + R = 1,$$

já que a partícula será, com certeza, transmitida *ou* refletida.

Dentre as consequências da hipótese de que o movimento dos elétrons é governado por uma função que obedece a uma equação de onda, a equação de Schrödinger, pode-se destacar:

- O coeficiente de reflexão R não é nulo para $E > V_b$. Assim, ao contrário do que acontece no caso clássico, algumas partículas são refletidas pelo degrau de potencial mesmo que tenham energia suficiente para ultrapassá-lo.
- O valor de R depende da diferença entre k_I e k_{II} , mas não do sinal desta diferença; em outras palavras, o coeficiente de reflexão seria o mesmo se as partículas estivessem se movendo de uma região de potencial maior para uma região de potencial menor

Para o caso em que $E < V_b$, classicamente espera-se que todas as partículas sejam refletidas em $x = x_0$. No caso quântico, a reflexão não se dá exatamente desta forma. Tem-se agora que k_{II} é um número imaginário, já que $E < V_b$. Assim, $\psi_{II}(x) = A_{II}e^{ik_{II}x} = A_{II}e^{-\alpha x}$ é uma exponencial real, onde $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_b - E)}{\hbar}}$. Portanto, a função de onda na região II não tem caráter oscilatório. Isto significa que o numerador e o denominador da equação 5.3 são complexos conjugados e portanto, $R = 1$, o que implica em $T = 0$. Isto está em concordância com o resultado clássico, pois esperava-se uma reflexão total para

partículas com $E < V_b$. Na região I, o módulo quadrado da função de onda é oscilatório (é uma onda estacionária), o que significa que a densidade de elétrons próximo à barreira oscila. Entretanto, outro resultado interessante da solução quântica é que nem todas as partículas são refletidas no ponto $x = x_0$. Como ψ_{II} é uma exponencial decrescente, a densidade de partículas na região II é proporcional a $\psi_{II}(x) = A_{II}^2 e^{-2\alpha x}$. Portanto, a função de onda não se anula em $x = x_0$, mas sua amplitude diminui exponencialmente. A onda penetra ligeiramente na região classicamente proibida ($x > x_0$), mas em seguida é totalmente refletida; este fenômeno é fundamentalmente quântico [French (1993)].

O módulo quadrado da função de onda na região I é oscilatório (é uma onda estacionária), o que significa que a densidade de elétrons próximo à barreira oscila; este fenômeno é fundamentalmente quântico.

5.3 Barreira de Potencial

Uma outra estrutura que pode ser utilizada na modelagem de sistemas reais é a barreira de potencial. Imagine um sistema composto por um ou mais átomos de um mesmo tipo A . Entre esses átomos, acrescenta-se um ou mais átomos iguais mas de um tipo diferente B . Assim como no modelo do degrau de potencial, um elétron nas vizinhanças de cada um desses átomos está sujeito a um potencial essencialmente constante, mas diferente em cada tipo de átomo. A Figura 5.2 esquematiza um sólido cuja composição segue a estrutura descrita acima. O comportamento das funções de onda eletrônicas na presença de uma barreira de potencial, que será visto a seguir, também é semelhante ao problema do degrau de potencial.

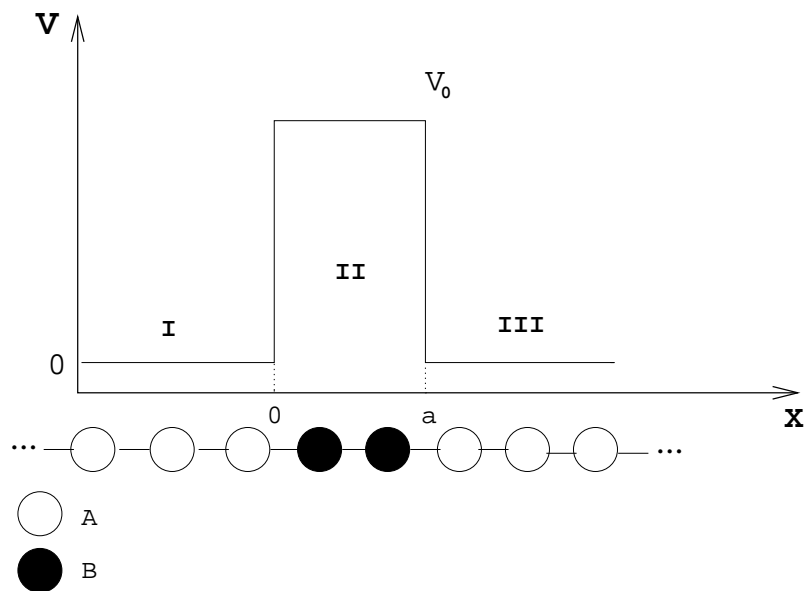


Figura 5.2: Barreira de Potencial

A barreira de potencial pode ser representada graficamente conforme a figura 5.2 e expressa da seguinte forma:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } 0 < x < a \text{ (região II)} \\ 0 & \text{para } x < 0 \text{ e } x > a \text{ (região I e III)} \end{cases} \quad (5.5)$$

No caso clássico, uma partícula que está se movendo da esquerda para a direita da região I, com $E > V_0$, continua a se mover para a direita na região II, mas com menor velocidade; ao passar da região II para a III recupera a velocidade inicial. Se a energia da partícula é menor que V_0 , ela não consegue penetrar na região II, mas é refletida na fronteira entre as regiões I e II e passa a se mover da direita para a esquerda na região I. No caso quântico, o comportamento das partículas é muito diferente, tanto para energias menores que V_0 quanto para energias maiores que V_0 . Para saber como se dá a transmissão de uma partícula através desse sistema precisa-se resolver a equação de Schrödinger para esta partícula sujeita a esse potencial. Como visto anteriormente, a equação de Schrödinger independente do tempo tem a seguinte forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (5.6)$$

Reconhecendo o operador hamiltoniano $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$, fica-se com uma equação de autovalores e autovetores, onde E é a energia do elétron e $V(x)$ é a função 5.5 que descreve a energia potencial.

A solução geral da equação 5.6 para cada região é:

- **Região I:**

$$\psi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \quad (5.7)$$

- **Região II:**

$$\psi_{II}(x) = A_{II} e^{-\alpha x} + B_{II} e^{\alpha x} \quad (5.8)$$

- **Região III:**

$$\psi_{III}(x) = A_{III} e^{ik_{III} x} \quad (5.9)$$

onde $k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}}$.

Como a partícula está se movendo da esquerda para a direita, não há o termo com momento linear negativo na região III. É importante observar que os expoentes de ψ_{II} são reais para $E < V_0$ e imaginários para

$E > V_0$, enquanto os expoentes de ψ_I e ψ_{III} são sempre imaginários. O valor de A_I depende da intensidade do feixe original e as constantes B_I , A_{II} , B_{II} e A_{III} podem ser determinadas através das condições de contorno do sistema, isto é, exigindo que ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ sejam contínuas em $x = 0$ e $x = a$. Assim, a princípio, como pode ser visto na figura 5.3 os processos possíveis são transmissão para a região III, com momento linear positivo (representada pela função $e^{ik_{III}x}$) e reflexão para a região I, com momento linear negativo (representada pela função e^{-ik_Ix}). As probabilidades de ocorrência de cada evento estão relacionadas aos coeficientes A_I , B_I e A_{III} .

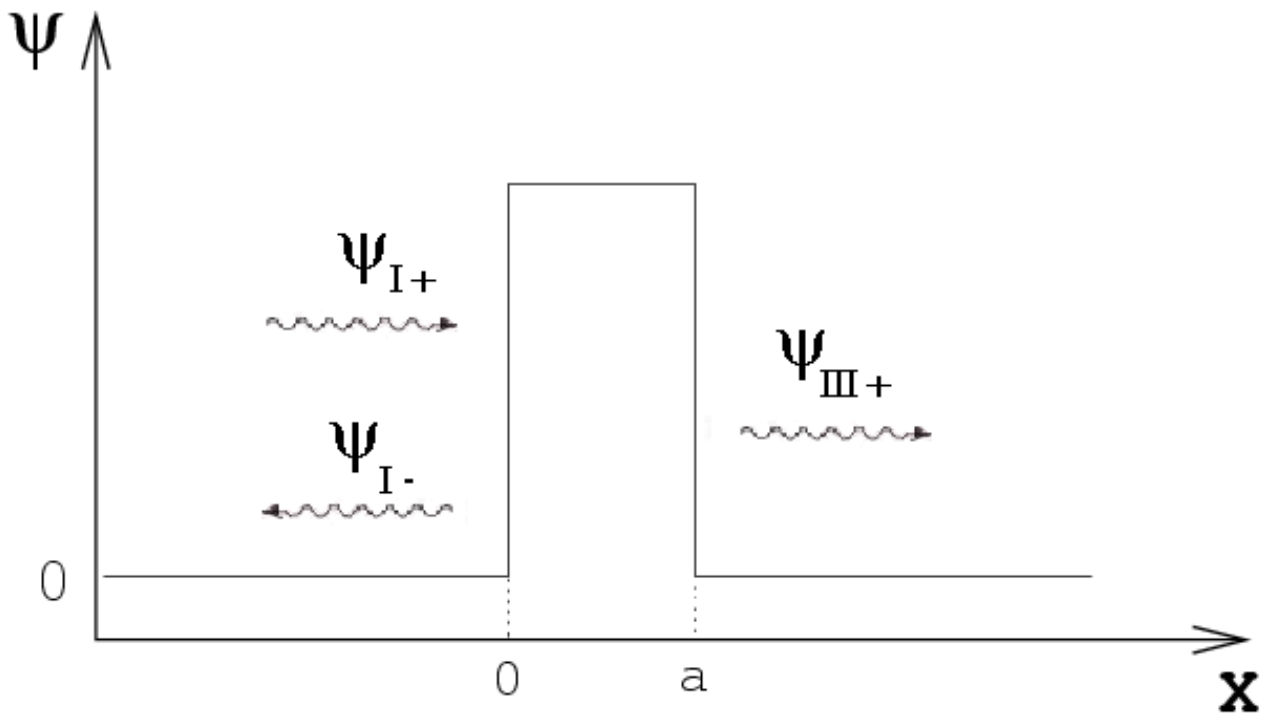


Figura 5.3: Processos possíveis quando uma partícula encontra uma barreira de potencial

A quantidade que determina o transporte eletrônico neste sistema é o coeficiente de transmissão, definido por

$$t = \frac{k_{III}A_{III}}{k_I A_I}$$

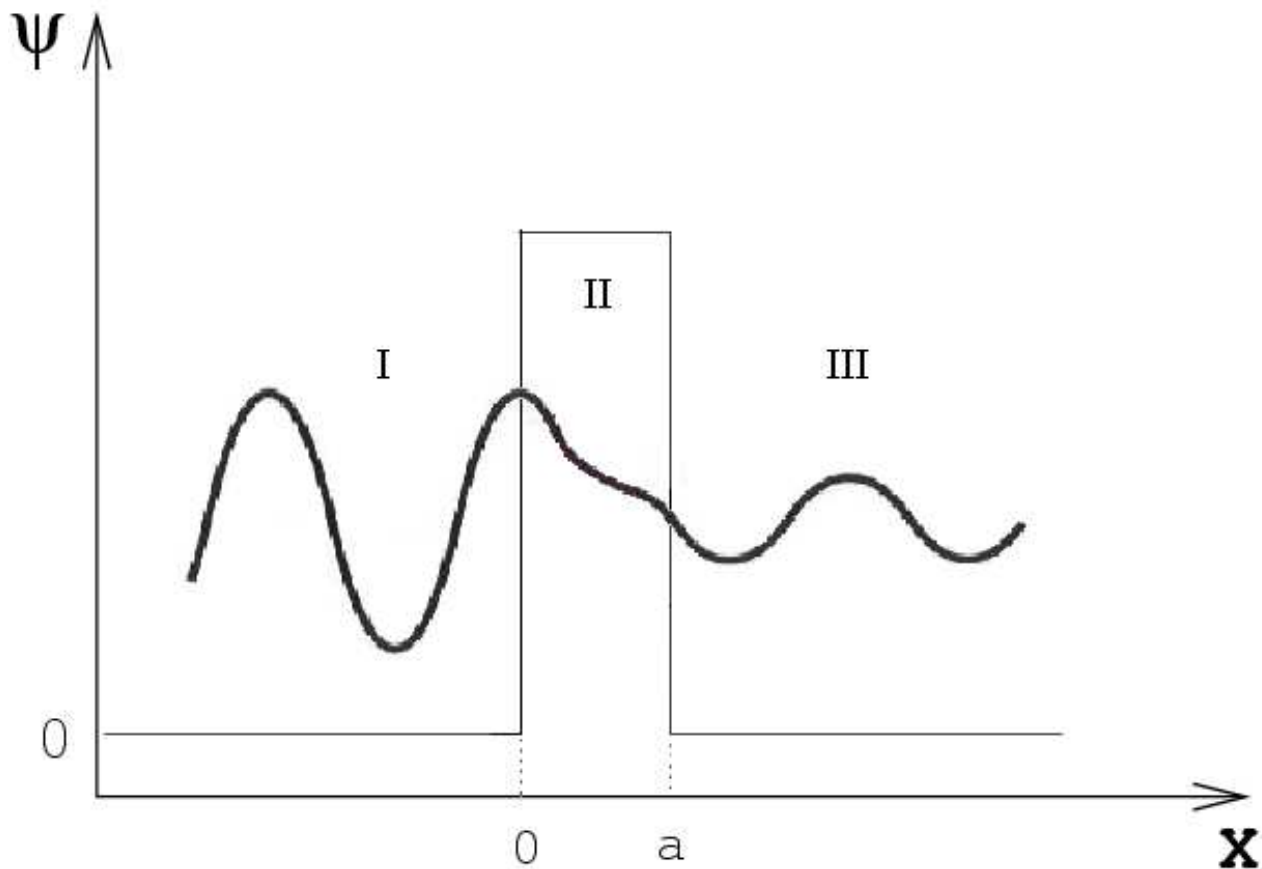


Figura 5.4: Penetração da barreira por uma onda com energia menor que a da barreira. Parte da onda consegue atravessar a barreira, embora, classicamente, a partícula não possa entrar na região $0 < x < a$, na qual a energia potencial é maior que a energia total.

Esta é uma quantidade complexa, cujo módulo quadrado dá a probabilidade de transmissão, $T = |t|^2$, de que a partícula incidente seja transmitida para a região II. No caso em que $E < V_0$, a amplitude da função de onda não cai bruscamente para zero na fronteira das regiões I e II, mas sofre um decaimento exponencial. Ao chegar à fronteira das regiões I e II, a função de onda volta a apresentar um comportamento oscilatório, como mostra a figura 5.4. Isto significa que existe uma probabilidade finita de que a partícula representada pela função de onda seja encontrada do outro lado da barreira, embora classicamente isso seja impossível, pois a partícula não teria energia suficiente para ultrapassá-la. Esse fenômeno quântico é denominado tunelamento [French (1993)]. O tunelamento ocorre quando a região de energia proibida é estreita o suficiente para que a onda evanescente ainda tenha uma amplitude diferente de zero na interface com a próxima região permitida.

Esta probabilidade cai exponencialmente com a largura da barreira.

O tunelamento quântico, além de ser um fenômeno fascinante, tem muitas implicações práticas. Existem, hoje, vários dispositivos eletrônicos que funcionam com base neste efeito. Um dos exemplos mais marcantes é o microscópio eletrônico de tunelamento. O tunelamento quântico também impõe sérios limites à miniaturização de componentes eletrônicos: com a diminuição das camadas de óxidos isolantes que separam diferentes regiões eletricamente ativas, a probabilidade de tunelamento através do óxido aumenta exponencialmente, inviabilizando o funcionamento do dispositivo.

5.4 Dupla-Barreira de Potencial

Visto o sistema composto por uma barreira de potencial, pode-se pensar em uma outra estrutura como sendo um sistema composto por duas barreiras de potencial, onde duas cadeias de átomos de um tipo A estão separadas entre si por cadeias de átomos de um tipo B. A figura 5.5 esquematiza esse modelo. Os valores dos potenciais da região **I** e **II** caracterizam diferentes materiais, A e B. A espessura das barreiras é a espessura do material B, e a distância entre as barreiras é a espessura da camada do material A depositada entre as camadas de B. Este sistema tem diversas propriedades interessantes no que diz respeito ao transporte eletrônico, a maioria delas relacionadas ao fenômeno de tunelamento.

Como pode ser visto na figura 5.5 os processos possíveis considerando que a partícula está se movendo da esquerda para a direita são transmissão para a região **III**, com momento linear positivo, reflexão para a região **I**, com momento linear negativo, transmissão para a região **V** com momento linear positivo e reflexão para a região **III**, com momento linear negativo. na região **V** só há a parte de momento linear positivo pois a partícula está se movendo da esquerda para a direita.

Precisa-se então, para conhecer a função de onda, resolver a equação de Schrödinger para esse sistema. O procedimento para encontrar a solução da equação de Schrödinger para a dupla-barreira é muito semelhante àquele adotado para uma única barreira de potencial. A diferença é que agora existem cinco regiões distintas: a região **I** é a primeira onde $V(x) = 0$, e é de onde a partícula deverá vir para incidir sobre o sistema. A região **II** é a da primeira barreira, com potencial $V(x) = V_0$, a **III** é a camada de material A separando as duas barreiras, a região **IV** é a segunda barreira, e a região **V** é a saída do dispositivo, com $V(x) = 0$ novamente.

Agora tem-se cinco regiões, resolvendo a equação de Schrödinger para cada região, obtém-se como solução uma combinação linear do tipo

$$\psi_r = A_r e^{ik_r x} + B_r e^{-ik_r x} \text{ para } r = \text{I, III e V}$$

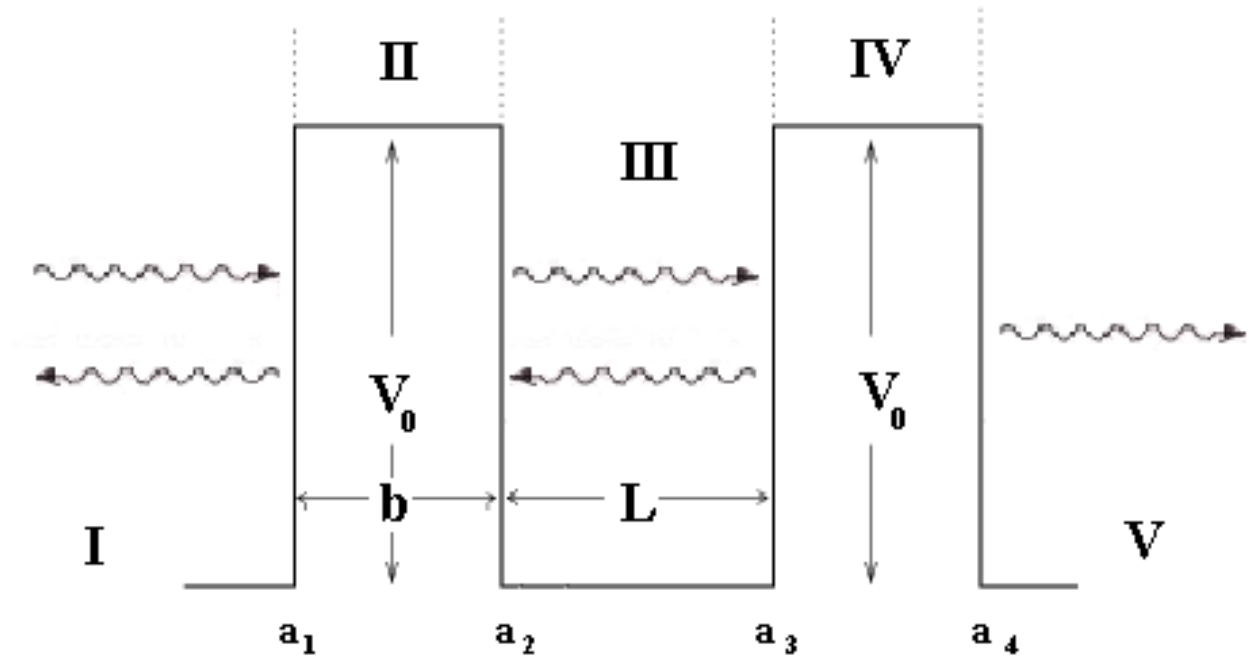


Figura 5.5: Dupla-barreira de potencial. L é a largura do poço, b é a largura da barreira e V_0 é a altura da barreira.

e

$$\psi_r = A_r e^{-\alpha x} + B_r e^{\alpha x} \text{ para } r = \text{II, IV}$$

onde $k_r = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$.

São nove coeficientes a determinar, sendo quatro os pontos de descontinuidade do potencial, temos ao todo oito equações vindas das condições de contorno, são elas:

$$\psi_r(a_1) = \psi_{r+1}(a_1) \tag{5.10}$$

$$\psi'_r(a_1) = \psi'_{r+1}(a_1) \tag{5.11}$$

para $r = I, II, III, IV$, onde

$$\begin{aligned}
\psi_I(x) &= A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \\
\psi_{II}(x) &= A_{II} e^{-\alpha x} + B_{II} e^{\alpha x} \\
\psi_{III}(x) &= A_{III} e^{ik_{III} x} + B_{III} e^{-ik_{III} x} \\
\psi_{IV}(x) &= A_{IV} e^{-\alpha x} + B_{IV} e^{\alpha x} \\
\psi_V(x) &= A_V e^{ik_V x}
\end{aligned}$$

e onde $k_I = k_{III} = k_V = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$.

Das condições de contorno 5.10 e 5.11 obtém-se o sistema:

$$\begin{aligned}
A_I e^{ik_I a_1} + B_I e^{-ik_I a_1} &= A_{II} e^{-\alpha a_1} + B_{II} e^{\alpha a_1} \\
ik_I (A_I e^{ik_I a_1} - B_I e^{-ik_I a_1}) &= \alpha (B_{II} e^{\alpha a_1} - A_{II} e^{-\alpha a_1}) \\
A_{II} e^{-\alpha a_2} + B_{II} e^{\alpha a_2} &= A_{III} e^{ik_{III} a_2} + B_{III} e^{-ik_{III} a_2} \\
\alpha (B_{II} e^{\alpha a_2} - A_{II} e^{-\alpha a_2}) &= ik_{III} (A_{III} e^{ik_{III} a_2} - B_{III} e^{-ik_{III} a_2}) \\
A_{III} e^{ik_{III} a_3} + B_{III} e^{-ik_{III} a_3} &= A_{IV} e^{-\alpha a_3} + B_{IV} e^{\alpha a_3} \\
ik_{III} (A_{III} e^{ik_{III} a_3} - B_{III} e^{-ik_{III} a_3}) &= \alpha (B_{IV} e^{\alpha a_3} - A_{IV} e^{-\alpha a_3}) \\
A_{IV} e^{-\alpha a_4} + B_{IV} e^{\alpha a_4} &= A_V e^{ik_V a_4} \\
\alpha (B_{IV} e^{\alpha a_4} - A_{IV} e^{-\alpha a_4}) &= ik_V A_V e^{ik_V a_4}
\end{aligned}$$

O sistema de equações algébricas que determina os coeficientes A_r e B_r é sub-determinado. É possível encontrar a solução analítica deste sistema de oito equações, mas sua forma final é bastante complicada. Optou-se por elaborar um programa que resolvesse numericamente o sistema em questão, já em preparação para os casos onde a solução analítica não é possível. O interesse principal continua sendo o coeficiente de transmissão, $t = \frac{k_V A_V}{k_I A_I}$, que descreve as propriedades de transporte eletrônico do sistema.

5.5 Resultados e Discussões do Sistema de Dupla-Barreira

O sistema de dupla barreira apresenta uma variedade de comportamentos interessantes, não observados nos sistemas anteriores. Estes comportamentos resultam das interferências quânticas entre as componentes da função de onda eletrônica refletidas múltiplas vezes pelas duas barreiras de potencial.

Novamente, será examinado o comportamento do coeficiente de transmissão como função da energia do elétron incidente. Os resultados para energias acima do valor do potencial da barreira podem ser vistos na

figura 5.6. As oscilações no valor do coeficiente de transmissão são resultado das interferências quânticas que a onda eletrônica sofre ao ser refletida múltiplas vezes entre as duas barreiras, depois de ter atravessado a primeira. Estas oscilações são características de sistemas quânticos. Nenhuma partícula clássica apresentaria probabilidades de transmissão com esse tipo de oscilações. Note que, para alguns valores de energia, a transmissão chega a 1, ou seja, a partícula é transmitida com certeza. Esses valores de energia correspondem a comprimentos de onda tais que as ondas eletrônicas sofrem interferência completamente construtiva entre as barreiras. Costuma-se dizer que os estados eletrônicos correspondentes a estas energias são **ressonantes**. Os valores de energia para os quais essas ressonâncias ocorrem dependem da distância entre as barreiras e da altura das barreiras, e podem ser usados para caracterizar indiretamente a geometria do sistema.

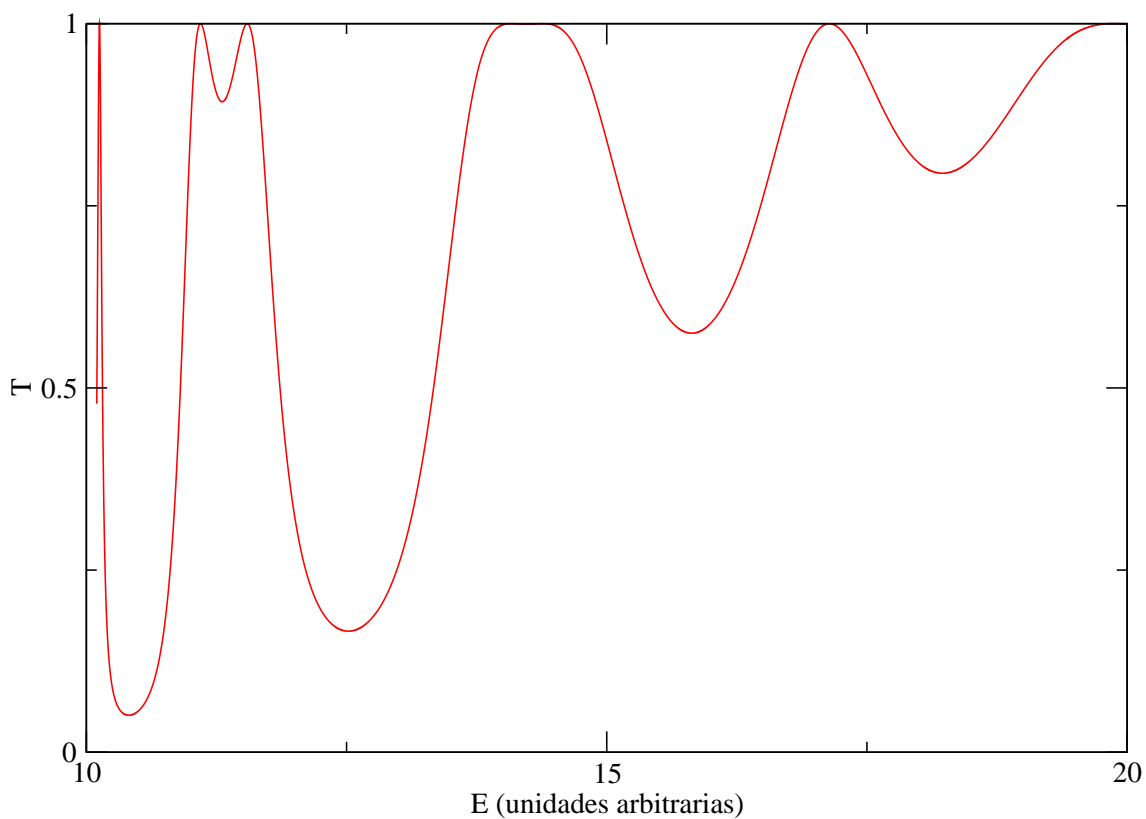


Figura 5.6: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia para o modelo com 2 barreiras, distantes entre si 3 unidades de comprimento e com largura de 3 unidades de comprimento. ($E > V$)

Tomando a energia da partícula menor que o valor do potencial da barreira, a probabilidade de transmissão comporta-se como mostrado na figura 5.7. A probabilidade de transmissão é praticamente nula a não ser para alguns valores discretos de energia, quando torna-se praticamente 1. Este comportamento se dá devido ao fato

de que os estados eletrônicos para uma região na qual o movimento clássico do elétron seria confinado têm energias quantizadas. Sendo assim, a partícula só pode atravessar a região entre as duas barreiras se tiver uma energia que coincide com algum dos estados eletrônicos quantizados do poço formado pelas duas barreiras. É importante ressaltar que o fato da partícula ter alguma probabilidade de atravessar a barreira, mesmo com uma energia total menor que a energia potencial na região da barreira, é um fenômeno essencialmente quântico, já mencionado anteriormente, denominado tunelamento. O tunelamento ocorre quando a região de energia proibida é estreita o suficiente para que a onda evanescente ainda tenha uma amplitude diferente de zero na interface com a próxima região permitida. Esta probabilidade cai exponencialmente com a largura da barreira.

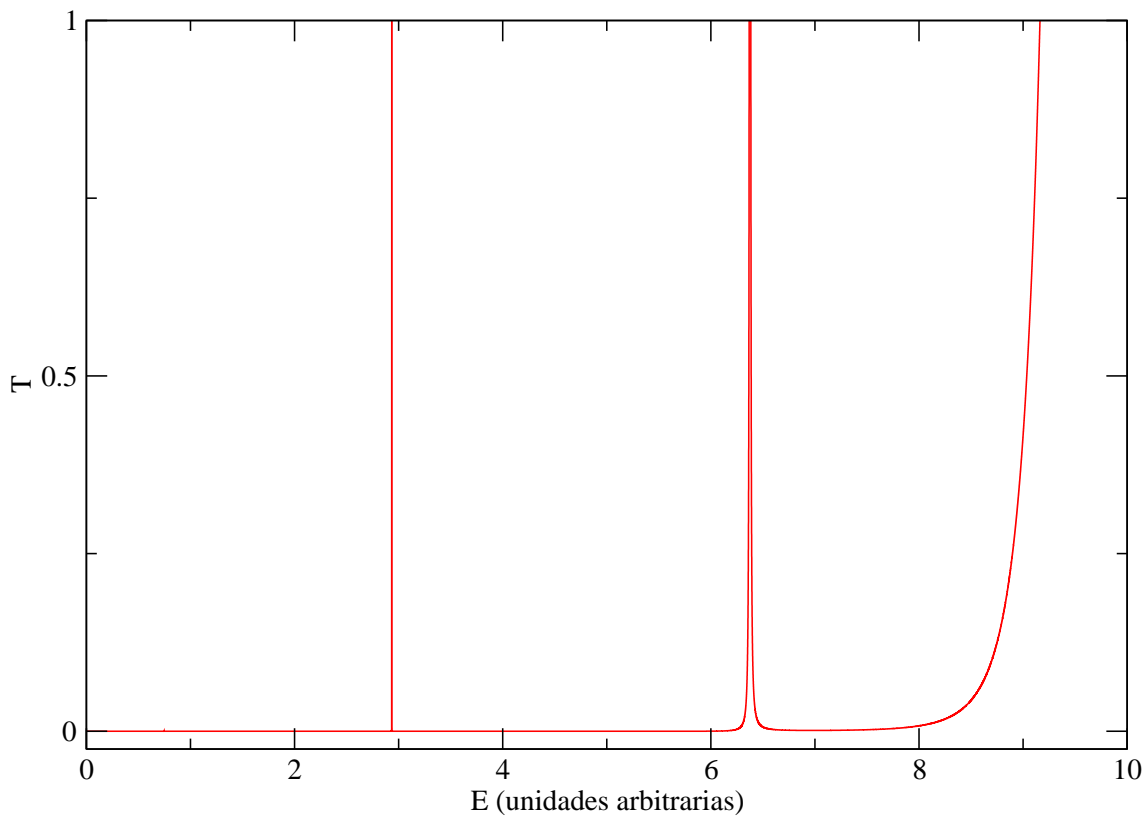


Figura 5.7: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia para o modelo com 2 barreiras, distantes entre si 3 unidades de comprimento e com largura de 3 unidades de comprimento. ($E < V$)

5.6 Múltiplas Barreiras de Potencial

Ao continuar aumentando o número de barreiras no sistema os efeitos das interferências quânticas ficarão cada vez mais complexos. Os conceitos fundamentais que permitem entender estes comportamentos são, entretanto, os mesmos que no caso da dupla barreira. A motivação experimental para este sistema está na possibilidade de formar arranjos de átomos de diferentes tipos, conforme esquematizado na Figura 5.8. Neste primeiro exemplo será considerado um arranjo ordenado de dois tipos de átomos, formando uma sequência de N barreiras de largura L , separadas por uma distância d . Mais uma vez, deseja-se calcular o coeficiente de transmissão do sistema, que permitirá caracterizar como um elétron atravessa a estrutura.

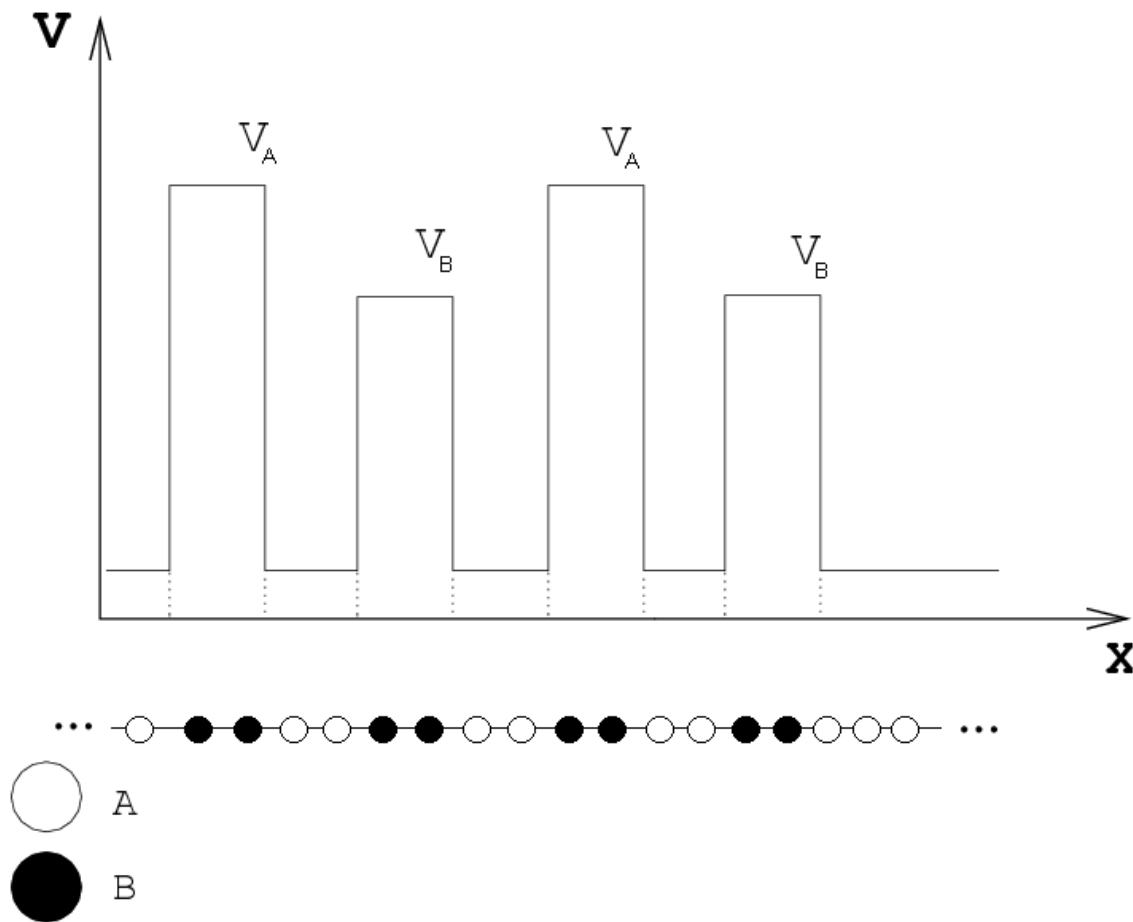


Figura 5.8: Sistema composto por n -átomos. A cada átomo está associado um potencial.

A solução direta da equação de Schrödinger seria muito trabalhosa para N grande. A cada barreira estão associadas quatro condições de contorno. Numa estrutura com N barreiras isto representa um sistema com $4N$ equações lineares. Existe, entretanto, uma maneira de encontrar o coeficiente de transmissão do sistema

sem resolver completamente a equação de Schrödinger. A idéia fundamental do método reside na possibilidade de expressar os coeficientes de transmissão e reflexão de um sistema composto através de combinações dos coeficientes dos subsistemas que o compõem. Para apresentar o método reconsidere o sistema composto por uma única barreira.

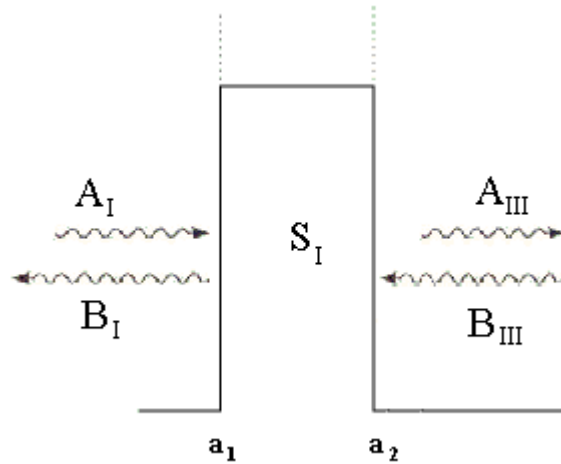


Figura 5.9: Barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S_I representa o sistema no qual a partícula está sujeita.

O sistema de equações associado à barreira é o mesmo considerado anteriormente, com uma única diferença: agora é importante considerar, na região **III**, a existência de uma onda refletida, com momento linear negativo, $e^{-ik_{III}x}$, pois há a possibilidade de que o elétron seja refletido por uma nova barreira colocada à direita desta. Essa estrutura está esquematizada na Figura 5.9.

Ao resolver o sistema associado à barreira de potencial encontra-se as amplitudes das ondas “que saem” da barreira, B_I e A_{III} , em função das amplitudes das ondas “que chegam” à barreira, A_I e B_{III} . Esta relação é linear, e pode, portanto, ser expressa na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} t_1 & r'_1 \\ r_1 & t'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_I \\ B_{III} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{III} \\ B_I \end{bmatrix}$$

Como A_{III} e B_I já foram calculados em função de A_I e B_{III} , é fácil encontrar t_1 , r'_1 , r_1 e t'_1 para o sistema de uma barreira. A matriz \hat{S} definida por

$$\hat{S} = \begin{bmatrix} t_1 & r'_1 \\ r_1 & t'_1 \end{bmatrix}$$

pode ser vista como um operador que atua nas amplitudes de onda que “chegam” à barreira (A_I e B_{III}) produzindo as amplitudes que “saem” da barreira (A_{III} e B_I)[Datta (1997)]. Este tipo de operador é conhecido

em Física como operador ou matriz de espalhamento.

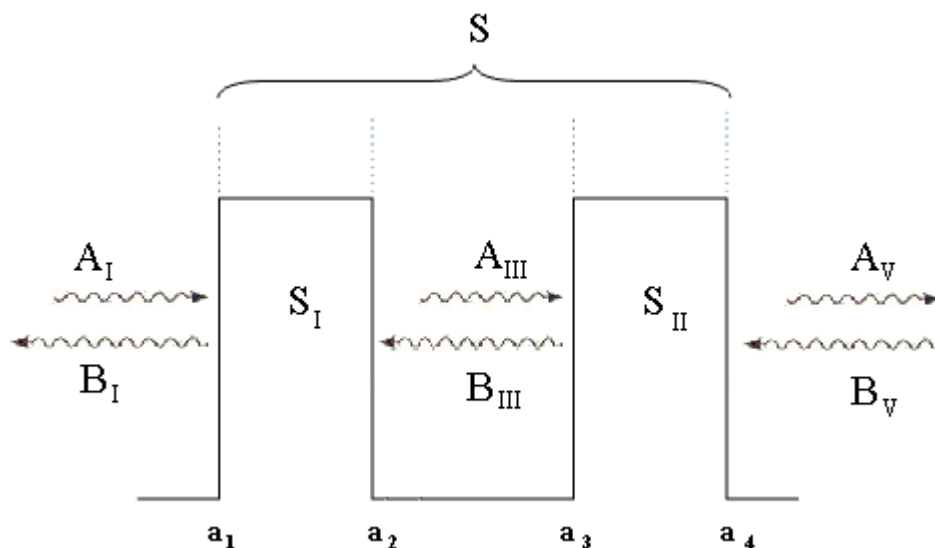


Figura 5.10: Sistema composto por dupla-barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S_n representam os sistemas nos quais a partícula está sujeita.

Acrescenta-se uma nova barreira ao sistema, diga-se, à direita da primeira. Chama-se a primeira barreira de 1 e a segunda de 2. Para calcular a matriz de espalhamento \hat{S}_f do sistema composto pelas duas barreiras basta reconhecer que as ondas que chegam à barreira 2 vindas da esquerda são as que saem da barreira 1 para a direita; da mesma forma, as ondas que chegam à barreira 1 vindas da direita são as que saem da 2 para a esquerda. As probabilidades finais de transmissão e reflexão correspondem à superposição dos infinitos processos de transmissão e reflexão possíveis. Assim, os elementos da matriz \hat{S}_f devem ser combinações dos elementos das duas matrizes de espalhamento \hat{S}_1 e \hat{S}_2 , associadas às barreiras 1 e 2, respectivamente.

Definindo

$$\hat{S}_f \equiv \begin{bmatrix} t_f & r'_f \\ r_f & t'_f \end{bmatrix}$$

o resultado da combinação de \hat{S}_1 e \hat{S}_2 é

$$\begin{aligned} t &= \frac{t_1 t_2}{1 - (r_2) r'_1} \\ t' &= \frac{t'_1 t'_2}{1 - (r_2) r'_1} \\ r &= r_1 + \frac{t_1 t'_1 r_2}{1 - r'_1 r_2} \\ r' &= r'_2 + \frac{r'_1 t'_2 t_2}{1 - r'_1 r_2} \end{aligned}$$

Os processos físicos relativos ao cálculo acima estão esquematizado na figura 5.10.

O sistema associado ao operador \hat{S}_f pode ser visto, então, como um único sistema composto, uma “caixa preta” cujas propriedades de transmissão e reflexão são conhecidas. Se acrescentar uma nova barreira ao sistema, ou mesmo uma outra “caixa preta”, basta conhecer o operador \hat{S} associado a cada parte a ser acrescentada. Repetindo estes procedimentos pode-se calcular, por exemplo, a matriz de espalhamento de um sistema composto por n barreiras.

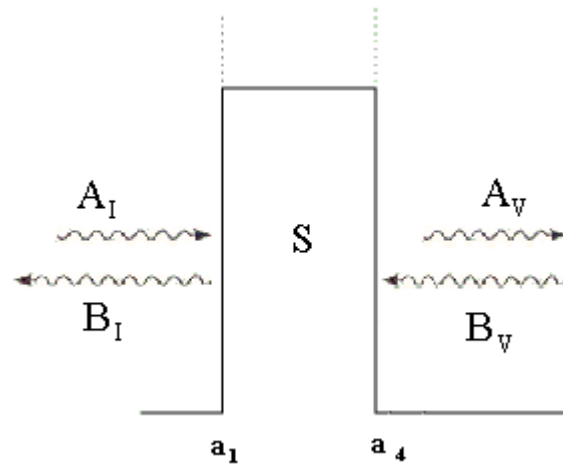


Figura 5.11: Barreira de potencial. A_n e B_n simbolizam as amplitudes de onda, S representa um operador relacionado a um único sistema, composto indiretamente dos coeficientes do operador S_I e S_{II} .

Um pseudo-código desta idéia proposta pode ser visto no algoritmo 5.6.1.

Algoritmo 5.6.1 Cálculo do Coeficiente de Transmissão Para o Sistema de Múltiplas Barreiras

- Estabelecer a quantidade de barreiras de potencial que compõem o sistema.
 - Estabelecer a energia potencial das barreiras.
 - Definir a posição em que a primeira barreira se encontra: a_1 e a_2
 - Definir a posição em que a segunda barreira se encontra: a_3 e a_4
 - Definir um valor para a energia incidente da partícula.
- Resolver a equação de Schrödinger para o sistema composto pela primeira barreira, com as condições de contorno:

$$\begin{aligned}\psi_I(a_1) &= \psi_{II}(a_1) \\ \psi'_I(a_1) &= \psi'_{II}(a_1) \\ \psi_{II}(a_2) &= \psi_{III}(a_2) \\ \psi'_{II}(a_2) &= \psi'_{III}(a_2)\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \\ \psi_{II}(x) &= A_{II} e^{-\alpha x} + B_{II} e^{\alpha x} \\ \psi_{III}(x) &= A_{III} e^{ik_I x} + B_{III} e^{-ik_I x}\end{aligned}$$

onde $k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$.

- Encontrar A_{III} e B_I em função de A_I e B_{III} .

- Determinar t_1 , r'_1 , r_1 e t'_1 , onde:

- Resolver a equação de Schrödinger para o sistema composto pela segunda barreira, da mesma forma utilizada para resolver o sistema composto pela primeira barreira, encontrando t_2, r'_2, r_2 e t'_2 .

- Combinar os coeficientes da primeira barreira com os da segunda barreira:

$$\begin{aligned}t &= \frac{t_1 t_2}{1 - (r_2) r'_1} \\t' &= \frac{t'_1 t'_2}{1 - (r_2) r'_1} \\r &= r_1 + \frac{t_1 t'_1 r_2}{1 - r'_1 r_2} \\r' &= r'_2 + \frac{r'_1 t'_2 t_2}{1 - r'_1 r_2}\end{aligned}$$

- **Para** cada barreira i acrescentada ao sistema

- Calcular os coeficientes t_i, r'_i, r_i e t'_i da nova barreira da mesma forma mostrada acima.

- Combinar estes coeficientes com os já calculados t, r', r e t' , obtendo assim novos coeficientes.

- **Fim Para**

5.7 Resultados e Discussões do Sistema de Múltiplas Barreiras

A figura 5.12 mostra o coeficiente de transmissão para o sistema composto por 1, 2, 5 e 100 barreiras. Em todos os casos, a partícula incidente possui energia superior ao potencial das barreiras. Perceba que, nesse sistema de múltiplas barreiras, há uma maior quantidade de oscilações no coeficiente de transmissão comparado ao sistema composto por dupla-barreira. Isto está exposto mais claramente na figura 5.13.

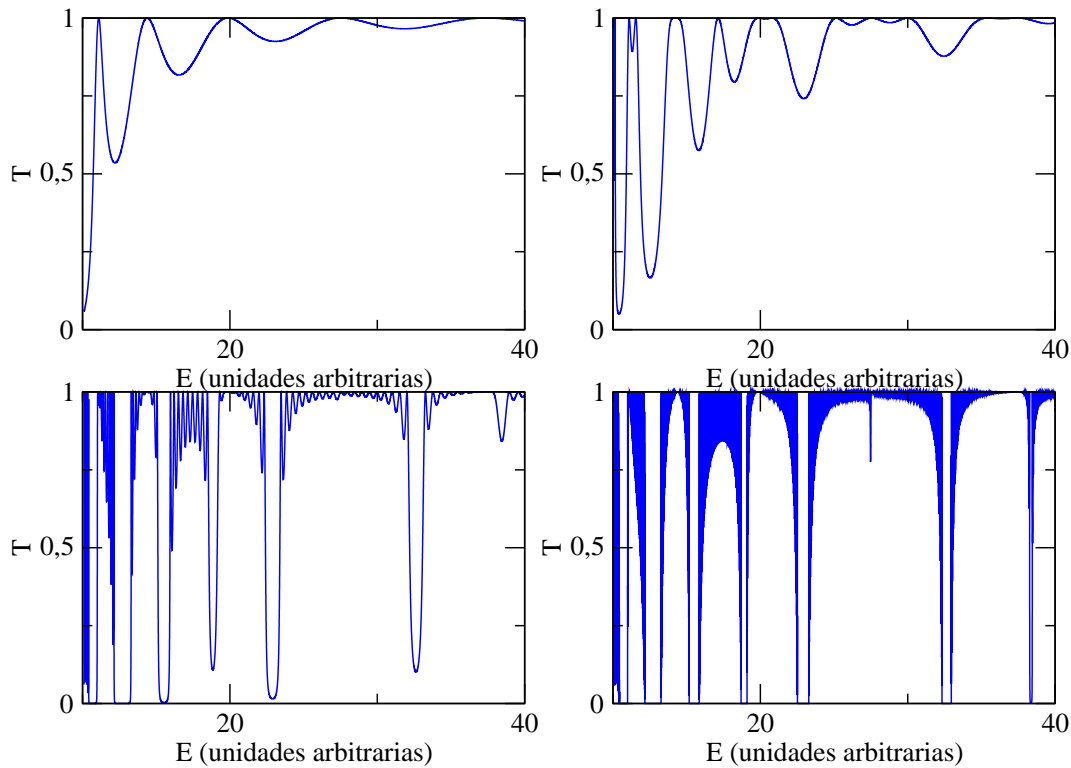


Figura 5.12: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 3 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E > V$. Na parte superior à esquerda o modelo é composto por 1 barreira. Na parte superior à direita o modelo é composto por 2 barreiras. Na parte inferior à esquerda o modelo é composto por 5 barreiras. Na parte inferior à direita o modelo é composto por 100 barreiras.

O aumento na quantidade de oscilações observadas no coeficiente de transmissão se dá devido ao fato de que no sistema de dupla-barreira a onda eletrônica sofre interferência apenas das múltiplas reflexões ocorridas após atravessar a primeira barreira. Com o aumento do número de barreiras, aumenta-se a quantidade de reflexões, o que faz com que o resultado das interferências quânticas seja mais complicado. Na figura 5.12 pode-se observar o aumento das oscilações no coeficiente de transmissão cada vez que se aumenta o número de barreiras. Quando o número de barreiras é muito grande, começam a surgir regiões praticamente

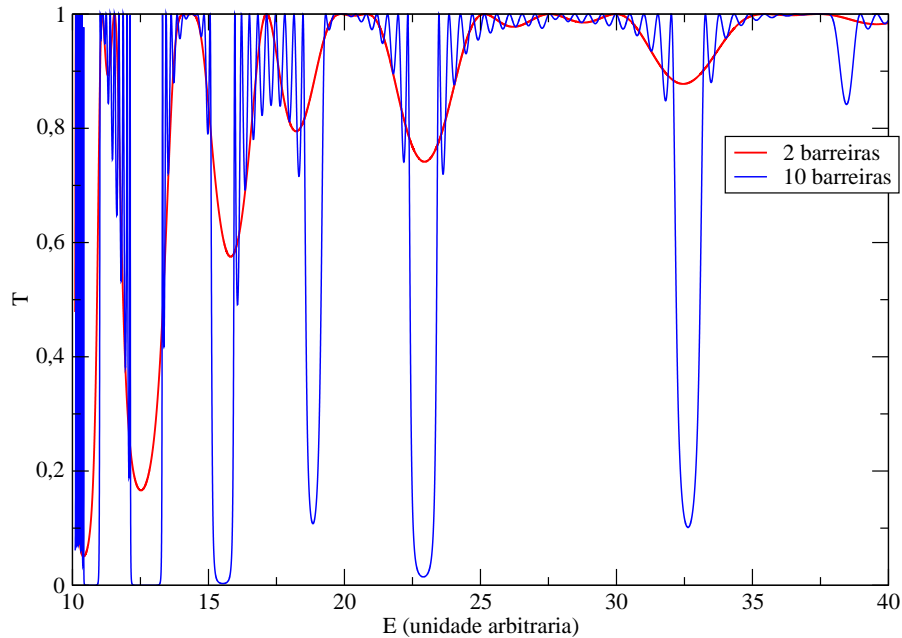


Figura 5.13: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 3 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E > V$. A curva azul refere-se ao sistema composto por 10 barreiras e a curva vermelha refere-se ao sistema composto por dupla-barreira.

contínuas no eixo das energias onde o coeficiente de transmissão é um, e outras regiões onde o coeficiente de transmissão é zero. Isto é uma característica fundamental de sistemas periódicos. Costuma-se dizer que as regiões onde o coeficiente de transmissão é 1 constituem “bandas de energias permitidas”, e as regiões onde o coeficiente de transmissão é zero são chamadas “bandas de energias proibidas”. A formação destas bandas é o conceito mais fundamental da teoria dos sólidos cristalinos.

No caso em que a energia da partícula incidente é menor que o potencial da barreira, no sistema de dupla-barreira a partícula só consegue atravessar a barreira caso sua energia coincida com alguns estados eletrônicos de energias quantizados do poço. Acrescentando novas barreiras ao sistema, surgem mais níveis localizados em algumas regiões de energias permitidas. Isso se dá devido ao fato de que a combinação de níveis anteriormente permitidos serão novos níveis permitidos. A comparação com o sistema de dupla-barreira pode ser visto na figura 5.14.

Na figura 5.15 pode-se observar o aumento da quantidade de picos do coeficiente de transmissão nas regiões de energias permitidas cada vez que se aumenta o número de barreiras.

É importante notar que, para energias eletrônicas abaixo da altura das barreiras, a transmissão se dá

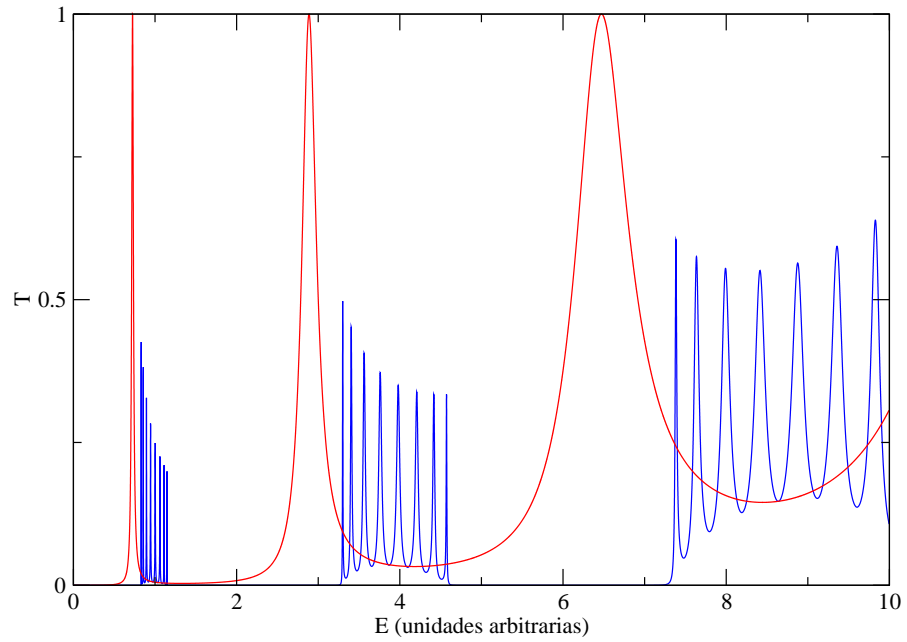


Figura 5.14: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 1,5 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E < V$. A curva azul refere-se ao sistema composto por 30 barreiras e a curva vermelha refere-se ao sistema composto por dupla-barreira.

sempre por tunelamento.

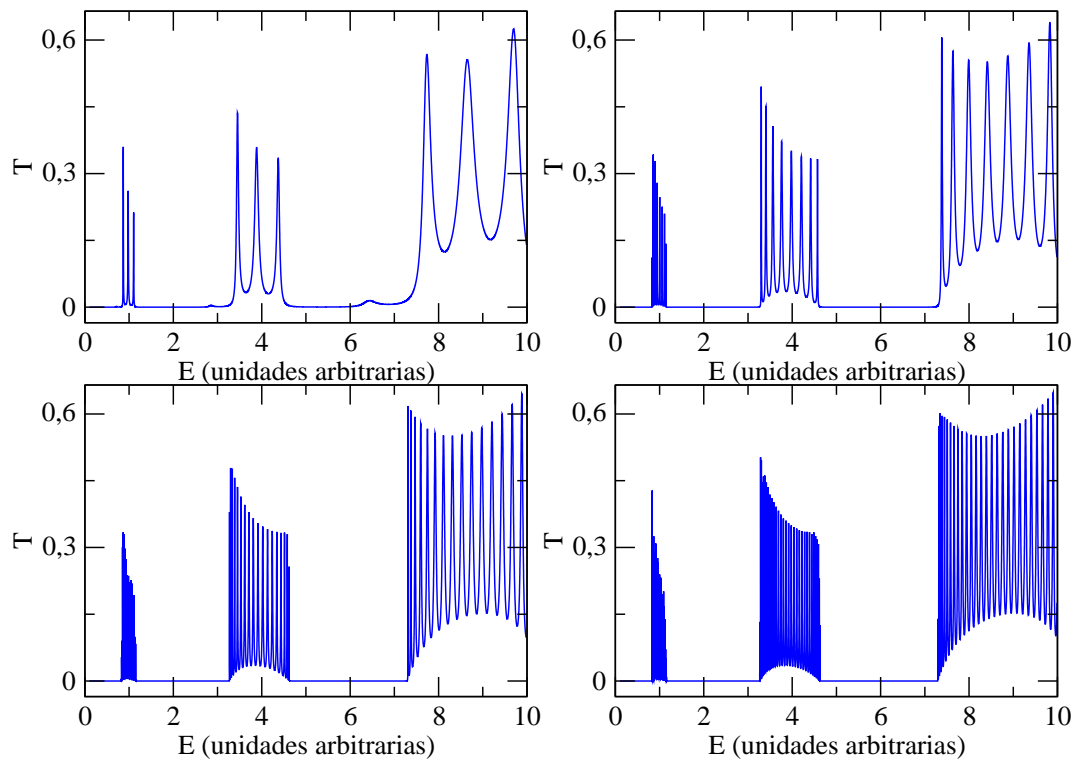


Figura 5.15: Probabilidade de transmissão em função da energia incidente para barreiras de altura $V = 10$ unidades de energia, sendo as barreiras com tamanho 1,5 unidades de comprimento, distantes entre si 3 unidades de comprimento, para valores de $E < V$. Na parte superior à esquerda o modelo é composto por 5 barreiras. Na parte superior à direita o modelo é composto por 10 barreiras. Na parte inferior à esquerda o modelo é composto por 20 barreiras. Na parte inferior à direita o modelo é composto por 35 barreiras.

5.8 Notas de Implementação

Em todas as implementações optou-se por usar a linguagem de programação Fortran 90, o sistema operacional Linux e o compilador ifort da Intel.

A linguagem de programação Fortran foi desenvolvida na década de 1950 e continua a ser usada hoje em dia. O nome origina da expressão “Formula Translator” (em português, tradução de fórmulas) [Metcalf (1999)]. Apesar de ter sido inicialmente uma linguagem de programação procedural, versões recentes de Fortran possuem características que permitem suportar programação orientada a objetos.

O primeiro compilador escrito para Fortran já era otimizado, pois os autores acreditavam que ninguém iria usar essa linguagem se a seu desempenho não fosse comparável ao da linguagem assembly. A linguagem Fortran foi largamente adotada por cientistas para a escrita de programas com cálculos numéricos, o que encorajou os desenvolvedores de compiladores a escrever compiladores que gerassem código mais rápido. A inclusão de um tipo de dados de número complexo na linguagem tornou a linguagem Fortran amplamente utilizada para a computação científica. Muitos avanços na teoria e no desenvolvimento de compiladores foram motivados pela necessidade de gerar código para programas de Fortran. Seu amplo uso nas ciências exatas como meteorologia, física, astronomia, geofísica e engenharia se dá devido aos bons compiladores que permitem gerar um código que execute rápido e eficiente.

Como Fortran foi umas das primeira linguagens de programação de alto nível, a sintaxe da primeira versão da linguagem é considerada obsoleta por muitos programadores que aprenderam linguagens mais modernas. No início, era difícil escrever uma estrutura de repetição “for”, e erros na escrita de apenas um caracter podiam levar a erros durante o tempo de execução em vez de erros de compilação [Metcalf (1999)]. As versões anteriores da linguagem Fortran não possuíam facilidades que seriam tidas como úteis em máquinas modernas, tais como a alocação dinâmica de memória. Deve-se, no entanto, levar em conta que a sintaxe de Fortran foi “melhorada” para o uso em trabalhos numéricos e científicos, e que muitas das suas deficiências têm sido abordadas em revisões mais recentes da linguagem.

Como exemplo, Fortran 90/95 possui comandos muito eficazes para efetuar operações matemáticas com matrizes, o que não só melhora em muito a leitura do programa como também fornece informação útil ao compilador, o que facilita a otimização e geração de código. Por estas razões, Fortran não é muito utilizado fora dos campos da ciência da computação e da análise numérica. Um exemplo do código em Fortran 90 pode ser visto no programa 5.8.1.

Aplicações não-comerciais (acadêmicas, educacionais e de pesquisa científica) podem utilizar versões educacionais de compiladores Fortran disponibilizados livremente para download (intel.com) por diferentes empresas, como Intel e Portland que executam em ambiente Linux.

Algoritmo 5.8.1 Exemplo de código em Fortran 90

! Este programa lê um numero real e escreve

! a area de um circulo com raio r.

```
program CIRCULO
```

```
  real r, area, pi
```

```
  parameter( pi = 3.14159 )
```

```
  write (*,*) 'Digite o raio r:'
```

```
  read (*,*) r
```

```
  area = pi*r*r
```

```
  write (*,*) 'Area = ', area
```

```
end program CIRCULO
```

O principal programa utilizado durante a análise de dados foi o Grace, um programa científico livre (licença geral pública GNU) excelente para gerar gráficos, aplicar transformações e fazer análise exploratória de dados, entre outras funcionalidades.

Muitas vezes, para a confirmação de resultados e para a resolução de sistemas lineares, foi utilizado o software Maple. Maple é um sistema de álgebra computacional comercial de uso genérico, comercializado pela Maplesoft. Constitui um ambiente para a computação de expressões algébricas, simbólicas, permitindo o desenho de gráficos de duas ou três dimensões. Foi utilizada a versão educacional gratuita.

Em algumas implementações fez-se uso da biblioteca LAPACK¹. LAPACK é uma biblioteca de rotinas para solução de sistemas de equações lineares e outros problemas de álgebra linear. O desempenho das rotinas LAPACK é obtido com chamadas de funções da biblioteca BLAS². Implementações altamente eficientes da biblioteca BLAS estão disponíveis para diversas plataformas. A biblioteca BLAS permite que as rotinas LAPACK obtenham alta performance com um código portátil. O pacote LAPACK-BLAS pode ser livremente obtido na Internet (netlib.org), é suportado pela maioria dos compiladores Fortran e C/C++.

Grande parte dos programas elaborados foi executada utilizando o Laboratório de Computação Científica da UFLA (LCC). O LCC dispõe de 40 processadores AMD Athlon 2000+ e 10 processadores Alpha ev68 833MHz. A estrutura do laboratório é a de um cluster para processamento paralelo com memória distribuída.

Todos os códigos das implementações estão disponíveis em <http://www.comp.ufla.br/~silveira>.

¹Linear Algebra Package

²Basic Linear Algebra Subprograms

Capítulo 6

SISTEMAS DESORDENADOS

6.1 Introdução

A idéia de um sólido perfeitamente cristalino é muito interessante do ponto de vista teórico; é também um excelente ponto de partida para a compreensão das propriedades dos sólidos reais. Na prática, entretanto, não há cristal perfeito. Sempre existem impurezas (átomos de um material diferente espalhados aleatoriamente no cristal) e/ou defeitos (átomos do próprio material colocados fora das posições “corretas”). Há ainda o fato de que, a temperatura finita, os átomos que compõem o sólido estão em movimento e, portanto, o sistema não pode ser considerado perfeitamente periódico.

A existência de imperfeições pode dificultar bastante a descrição teórica de um sistema físico. Por isso ela é vista pelos físicos teóricos, em geral, como um incômodo indesejável. Entretanto, compreender os efeitos advindos da existência de imperfeições é essencial para o desenvolvimento de uma descrição completa dos sistemas físicos reais. Além disso, estes efeitos podem dar origem a fenômenos físicos muito interessantes.

O transporte de corrente elétrica por um sólido cristalino é um exemplo em que a inclusão da desordem é essencial para a descrição correta dos fenômenos físicos observados. É um fato experimental amplamente conhecido que metais reais apresentam uma certa resistência à passagem de corrente elétrica. Microscopicamente isso significa que vários dos elétrons que fazem parte da corrente elétrica são desviados de sua “trajetória retilínea” (ou seja, do seu estado com momento linear bem definido), e deixam de fazer parte da corrente. A teoria dos sólidos baseada num arranjo perfeitamente periódico dos átomos prevê, entretanto, que a resistência de um metal deveria ser nula, ou seja, um elétron que se propague numa rede cristalina perfeita não sofre qualquer tipo de “desvio”. Ao incluir na teoria a existência de defeitos na rede cristalina e/ou a presença de vibrações coletivas da rede (conhecidas como fônons), encontra-se uma resistência elétrica finita para os metais. Assim, o querer descrever corretamente as propriedades de transporte eletrônico de sistemas

reais é essencial levar em conta a presença de imperfeições no sólido em questão.

Hoje em dia, com as novas técnicas de manipulação nanoscópica de materiais, é possível criar sistemas muito pequenos, com pouquíssimas imperfeições. Por outro lado, quanto menor um sistema (na verdade, quanto menor sua dimensionalidade) mais importantes tornam-se os efeitos da presença de imperfeições. Um bom exemplo desta relação entre dimensionalidade e efeito das imperfeições é o fenômeno de localização eletrônica [Datta (1997)].

Ao se propagar em um sistema no qual sua energia potencial sofre variações abruptas, a onda eletrônica sofre reflexões que dão origem às interferências quânticas discutidas no capítulo anterior. De modo muito simplificado, pode-se dizer que, se as variações de energia potencial seguem um padrão periódico, as interferências entre essas várias ondas dão origem a uma onda resultante cujo envelope estende-se periodicamente por todo o cristal. Esta afirmação qualitativa é substantiada pelo teorema de Bloch [Kittel (1996)], que estabelece com precisão a forma da função de onda de um elétron num potencial periódico. Por outro lado, se as variações da energia potencial são aleatórias, o resultado das interferências quânticas é uma função de onda com um envelope exponencial decrescente. Isto significa que a probabilidade de encontrar um determinado elétron cai rapidamente com a distância a algum ponto do cristal; por isso diz-se que este elétron está “localizado”, em contraste com as ondas eletrônicas “extendidas” previstas pelo teorema de Bloch. Num sólido desordenado tridimensional podem existir tanto funções de onda extendidas quanto localizadas. Em duas e uma dimensão, entretanto, **todas** as ondas eletrônicas possuem envelope exponencial decrescente, ou seja, são localizadas. Rigorosamente tal sistema seria um isolante: se as ondas eletrônicas são localizadas os elétrons têm mobilidade zero e, portanto, o sistema não pode conduzir corrente elétrica. Entretanto, se o sistema for pequeno o suficiente, as caudas das exponenciais decrescentes podem atravessá-lo completamente, e o sistema é capaz ainda de conduzir corrente elétrica. É este tipo de sistema que será abordado neste capítulo.

6.2 Sistemas de Dupla-Barreira

Para compreender os efeitos da desordem será inicialmente analisado um sistema bastante simples, já abordado nesta monografia: a dupla-barreira. É difícil caracterizar uma única dupla-barreira como desordenada. Ao escolher aleatoriamente os valores das alturas, larguras e/ou distâncias entre as duas barreiras tem-se ainda um sistema de dupla-barreira cujo coeficiente de transmissão pode ser calculado como na seção anterior. Não se nota nenhuma irregularidade na variação deste coeficiente com a energia, por exemplo. Entretanto, ao pensar em um conjunto com muitos sistemas de dupla-barreira, no qual cada elemento possui parâmetros escolhidos aleatoriamente dentro de um certo intervalo, o coeficiente de transmissão de cada sistema é uma variável aleatória.

Esta situação pode parecer artificial, mas pode-se imaginá-la acontecendo na prática da seguinte forma: sabe-se que ao serem produzidos dispositivos nanoscópicos ou mesoscópicos, como os sistemas de dupla-barreira, as espessuras das barreiras podem sofrer pequenas variações aleatórias de um dispositivo para o outro. Assim, um lote destes dispositivos representa um conjunto como o descrito no parágrafo anterior. Este tipo de conjunto de sistemas de um mesmo tipo com alguns parâmetros definidos aleatoriamente é conhecido em física como *ensemble*.

Uma maneira de caracterizar quantitativamente um ensemble é fornecer os valores médios de grandezas de interesse; neste caso a grandeza de interesse é o coeficiente de transmissão. Nem sempre, entretanto, os valores médios são suficientes para caracterizar completamente o ensemble, principalmente quando se utiliza o valor médio de apenas uma grandeza. Neste caso é necessário determinar a distribuição de valores desta grandeza. É isso será feito agora para ensembles de sistemas de dupla-barreira.

A distribuição de probabilidades do coeficiente de transmissão T pode ser obtida através do cálculo direto de T para um conjunto de N amostras pertencentes ao ensemble, escolhidas aleatoriamente. Este cálculo é necessariamente aproximado, já que a variável aleatória que caracteriza o ensemble é contínua. Entretanto, se N for suficientemente grande, é possível tornar o erro na determinação da distribuição bastante pequeno. Ao conhecer a dependência entre T e os parâmetros que caracterizam o sistema é possível obter a distribuição de forma exata, como será mostrado a seguir. O conhecimento de T como função dos parâmetros do sistema é, entretanto, praticamente impossível para sistemas mais complexos que a dupla-barreira. Assim, o método do cálculo direto para N sistemas sorteados é o que tem aplicação mais geral. Será interessante, entretanto, observar o comportamento dos dois métodos num caso em que é possível determinar T em função dos parâmetros do sistema.

A desordem de um sólido pode ser classificada em estrutural ou composicional. Na desordem estrutural os átomos que compõem o sistema são todos do mesmo tipo, mas as posições destes átomos variam aleatoriamente. Diz-se que um sistema tem desordem composicional se ele é composto por dois ou mais tipos de átomos distribuídos aleatoriamente numa rede periódica. Em sistemas reais os dois tipos de desordem estão presentes, em geral. É útil, entretanto, considerá-los separadamente para estudar seus efeitos.

6.2.1 Desordem estrutural

Para simular sistemas com desordem estrutural foi calculado o coeficiente de transmissão de N sistemas de dupla-barreira cujas larguras das barreiras foram escolhidas aleatoriamente num intervalo $[L - \delta L, L + \delta L]$ segundo uma distribuição uniforme. A intensidade da desordem pode ser quantificada pelo tamanho do intervalo de variação da largura, $2\delta L$.

Conforme acima mencionado, é relativamente fácil obter o coeficiente de transmissão de uma dupla-barreira como função da largura das barreiras, $T(L)$. De posse desta função é possível obter a distribuição de probabilidades para $T(L)$ supondo que L é uma variável aleatória com uma dada distribuição, que será considerada uniforme. Assim, é interessante a quantidade $P(T)$, que é a densidade de probabilidade associada a T . Isso significa que um valor de T entre T e $T + dT$ ocorrerá com probabilidade $d\mathcal{P}(T) = P(T)dT$. Sabendo que a densidade de probabilidade de L é $\rho(L) = \frac{1}{\delta L}$, e encarando $P(T)$ como uma função composta $P[T(L)]$, é fácil mostrar que

$$P(T) = \rho(L) \left(\frac{dT}{dL} \right)^{-1} \quad (6.1)$$

Na figura 6.2 está os histogramas que representam o número de ocorrências de cada valor do coeficiente de transmissão T para diferentes valores da energia do elétron incidente. Foram escolhido valores de energia do elétron incidente maiores que a altura da barreira porque nesta região T é uma função suave dos parâmetros do sistema, o que não ocorre para energias abaixo da altura da barreira. Para esta simulação foi utilizado um ensemble com 10^5 sistemas e foi escolhido $\delta L = 2 \times 10^{-1}$. Na mesma figura tem-se a distribuição de coeficientes de transmissão obtida a partir de $T(L)$, que pode-se obter numericamente. Desta relação numérica foi calculado uma aproximação para a derivada dT/dL e utilizou-se a equação 6.1 para obter $P(T)$. Nota-se que a concordância é excelente. Isto é uma evidência de que o procedimento de cálculo direto de T a partir de uma amostragem do ensemble, embora aproximado, fornece resultados bastante satisfatórios.

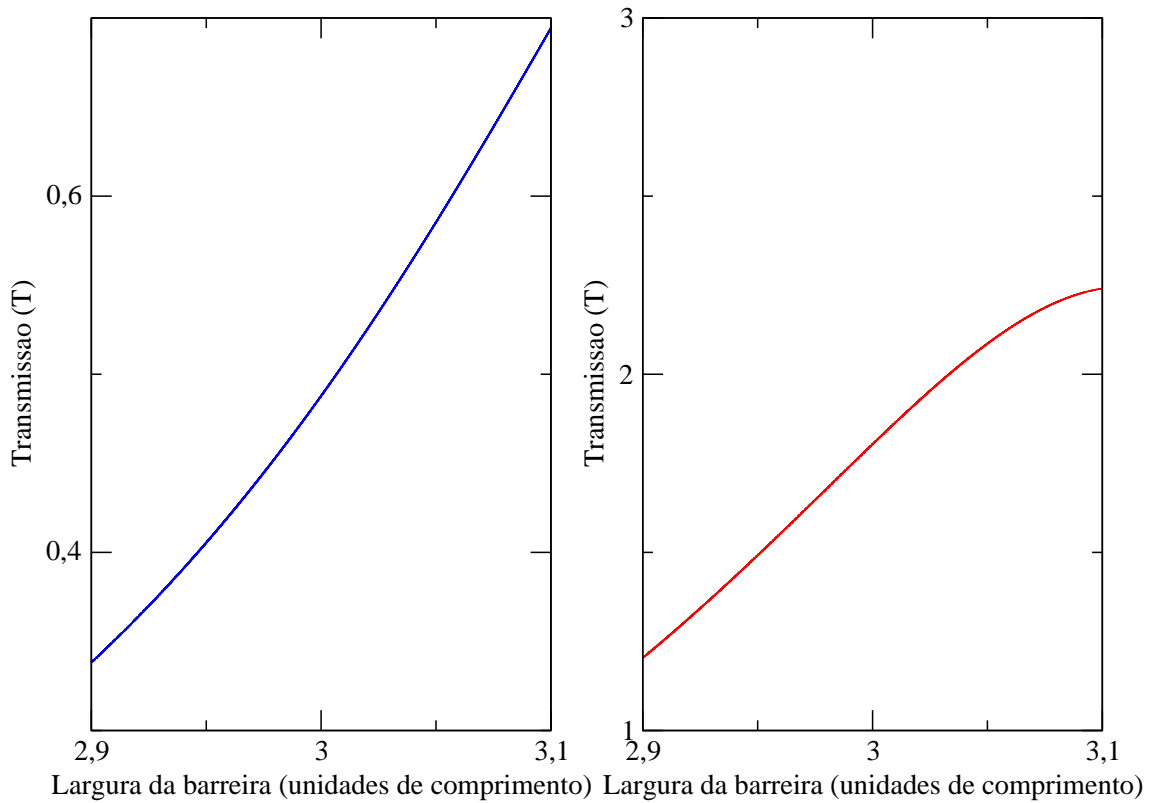


Figura 6.1: Na parte à esquerda tem-se o gráfico da transmitância x largura da barreira de potencial ($T(L)$). Na parte a direita tem-se a derivada da transmitância em relação à largura $\frac{dT(L)}{dL}$. Em ambos os casos $E = 10.9$ unidades de energia.

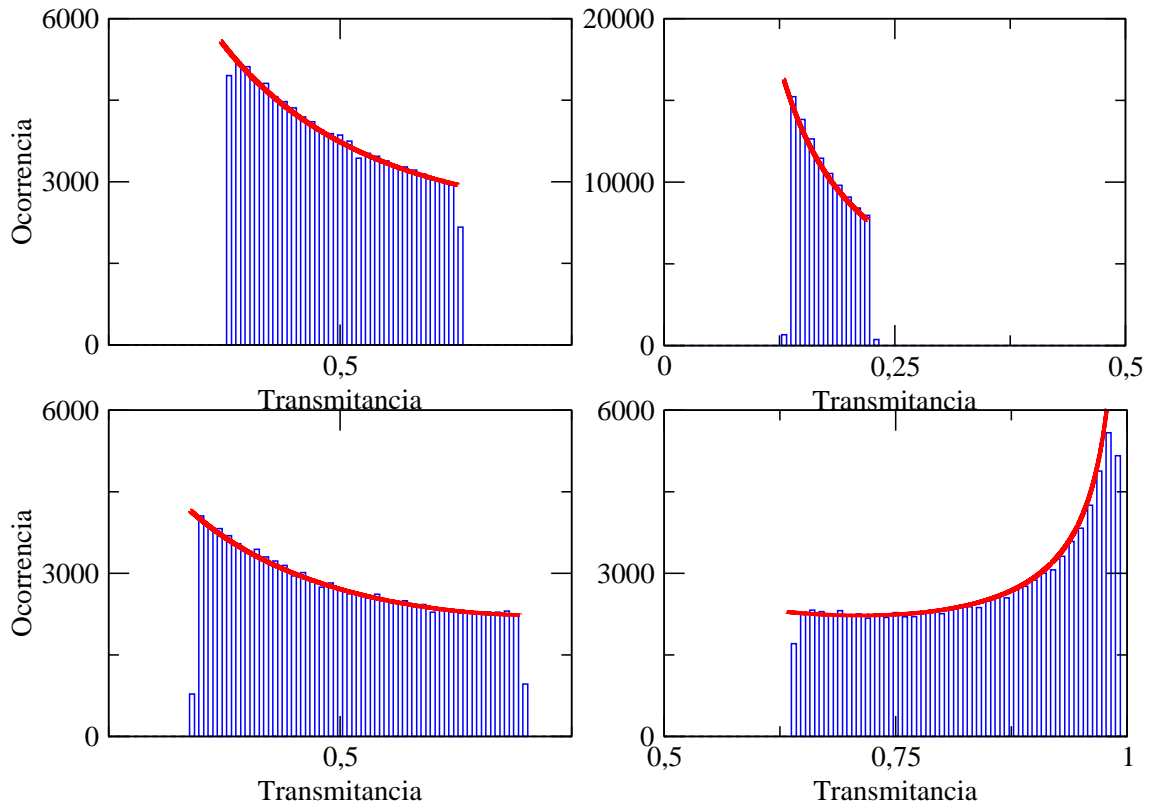


Figura 6.2: Distribuições de transmitâncias para variação aleatória da distância entre as barreiras num sistema de dupla-barreira. O *ensemble* foi composto por 100000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.1$, no segundo $E = 10.2$, no terceiro $E = 10.9$ e no ultimo, $E = 11.0$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).

6.3 Distribuição de Condutâncias em Sistemas Compostos por Múltiplas Barreiras

Na seção anterior foi possível utilizar dois métodos diferentes para calcular a distribuição de coeficientes de transmissão, devido à simplicidade do sistema. Os métodos utilizados são bons exemplos de duas abordagens distintas comumente utilizadas no estudo de sistemas físicos: a simulação e o cálculo numérico. A aplicação de um ou outro depende fundamentalmente da natureza do problema. Para os sistemas que serão tratados agora é praticamente impossível determinar a relação entre o coeficiente de transmissão e os parâmetros que caracterizam os sistemas. Sendo assim só, resta apenas a abordagem da simulação, ou seja, a “geração virtual” de ensembles de sistemas desordenados. Com este objetivo foi elaborado programas para simular sistemas com desordem estrutural e composicional. Será analisado, inicialmente, o caso da desordem estrutural.

Considere a desordem estrutural como uma variação aleatória da distância L entre as barreiras. Assim como no caso da dupla-barreira, suponha que $L = L_0 \pm \delta L$, onde δL é uma variável aleatória com distribuição uniforme no intervalo $[0, 2.5 \times 10^{-2}]$. As unidades de L e de energia são tais que $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$. Agora os interesses principais residem em duas funções: a distribuição de transmitâncias, representada aqui pelo histograma de ocorrências de valores de T , e o próprio coeficiente de transmissão como função do comprimento do sistema. Estas duas quantidades podem nos informar sobre a natureza do transporte eletrônico nos sistemas que considerados. Para determiná-las será tomado um ensemble com 10^5 sistemas.

Na figura 6.3 tem-se a média do coeficiente de transmissão, $\langle T \rangle$ em função do comprimento do sistema (medido em número de barreiras), para alguns valores de energia do elétron, acima da energia das barreiras. É interessante notar que $\langle T \rangle$ oscila como função de l para l pequeno. Isso é uma assinatura das interferências quânticas que ocorrem neste sistema, que sobrevive mesmo na presença de desordem. Já na região de l grande ($l \gtrsim 100$) $\langle T \rangle$ é claramente uma função monotonicamente decrescente de l . Este resultado é qualitativamente compatível com o fato de que os estados eletrônicos são localizados em sistemas unidimensionais desordenados. Para confirmar quantitativamente a ocorrência de localização é necessário verificar se o comportamento de $\langle T \rangle$ é realmente exponencial. Na figura 6.4 está apresentado novamente $\langle T \rangle$ como função de l , desta vez num gráfico semi-log. É evidente o comportamento linear de $\langle T \rangle$ para $l \gtrsim 100$, mostrando que $\langle T \rangle \sim \exp(-l/\lambda)$. O coeficiente λ , que determina a taxa com que a transmitância decresce, é diferente para diferentes energias, como pode ser visto na figura 6.4. De qualquer forma, é fácil perceber que $\lim_{l \rightarrow \infty} \langle T \rangle = 0$, o que significa que estes sistemas são isolantes no limite de l grande. Esta é exatamente a natureza do fenômeno de localização eletrônica, descrito na introdução deste capítulo. O coeficiente λ é denominado comprimento de localização, e indica o comprimento do sistema a partir do qual a transmitância

começa a tornar-se desprezível. Em outras palavras, um sistema cujo comprimento é muito maior do que seu comprimento de localização pode ser considerado isolante.

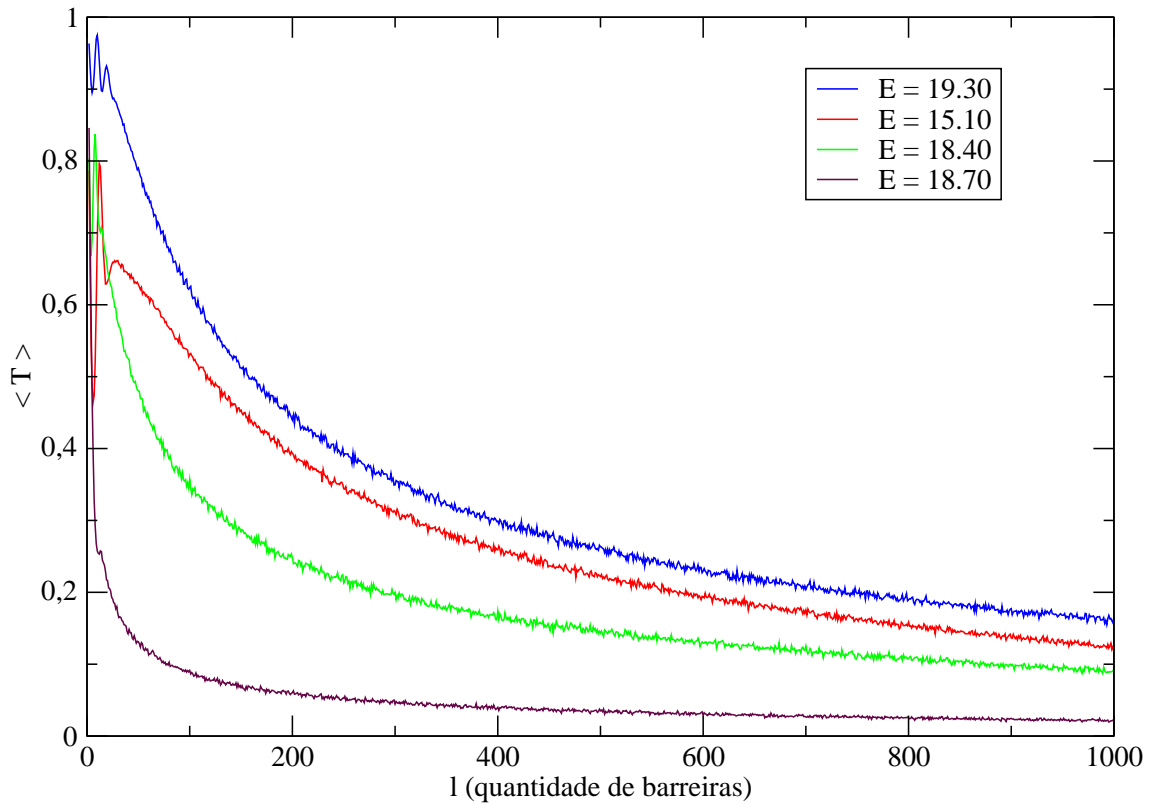


Figura 6.3: Média da transmitância em função da quantidade de barreiras que compõem o sistema.

É fácil calcular o comprimento de localização de um sistema quando se conhece $\langle T \rangle$ como função de l . Basta ajustar esta curva por uma exponencial e obter a taxa de decaimento a partir do ajuste. O resultado do procedimento de ajuste está ilustrado na figura 6.4 pelas linhas cheias. A tabela 6.1 mostra as expressões para as curvas ajustadas para alguns valores de energia, bem como os valores dos respectivos comprimentos de localização.

Tabela 6.1: Aproximação das Exponenciais para valores de energia arbitrários

<i>Energia</i>	<i>Exponencial</i>	λ
$E = 19.30$	$0.641e^{-0.0015x}$	639
$E = 10.60$	$0.054e^{-0.0009x}$	1054
$E = 18.70$	$0.002e^{-0.0021x}$	463

O comprimento de localização de um sistema é determinado essencialmente pela energia do elétron inci-

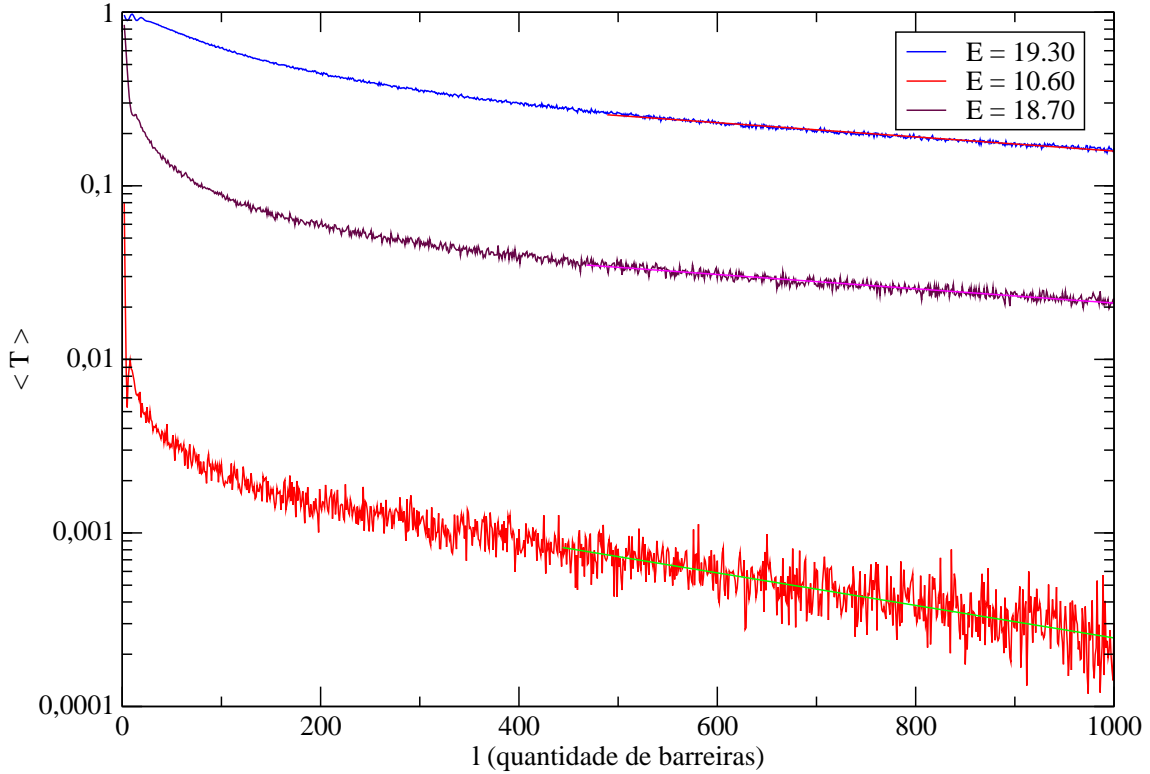


Figura 6.4: Ajuste para as exponenciais.

dente e pelo grau de desordem do sistema (representado, no nosso caso, pelo tamanho do intervalo no qual δL é sorteado). Diferentes sistemas com o mesmo grau de desordem podem estar em diferentes regimes de transmissão para a mesma energia eletrônica, dependendo do comprimento do sistema. A escala de comprimentos que determina o regime de transmissão é o comprimento de localização. Seja l o comprimento do sistema e λ o comprimento de localização. Se $l \ll \lambda$ diz-se que o sistema está no regime balístico; $\langle T \rangle$ é tipicamente bastante alta. Se $l \lesssim \lambda$ o sistema está no regime difusivo, caracterizado por valores intermediários de transmitância. Se $l \gg \lambda$ o sistema está no regime localizado, caracterizado por valores muito baixos da transmitância eletrônica. O sistema comporta-se essencialmente como um isolante. Estes regimes, entanto, servem mais como guias para o comportamento do sistema do que como um sistema de classificação. A caracterização completa do transporte eletrônico nestes sistemas exige que se conheça, além do valor médio da transmitância, sua distribuição.

A figura 6.5 mostra os histogramas para ensembles de sistemas com $l = 50$ barreiras, com diferentes energias do elétron incidente. O grau de desordem é o mesmo considerado na figura 6.3. Note que os histogramas (a) e (c) têm formas muito semelhantes. Isso significa que os dois sistemas estão no mesmo regime de transporte. Isto pode ser confirmado pela comparação do tamanho destes sistemas com seus respectivos

comprimentos de localização. Em ambos os casos $l \ll \lambda$, o que indica que os dois sistemas estão no regime localizado.

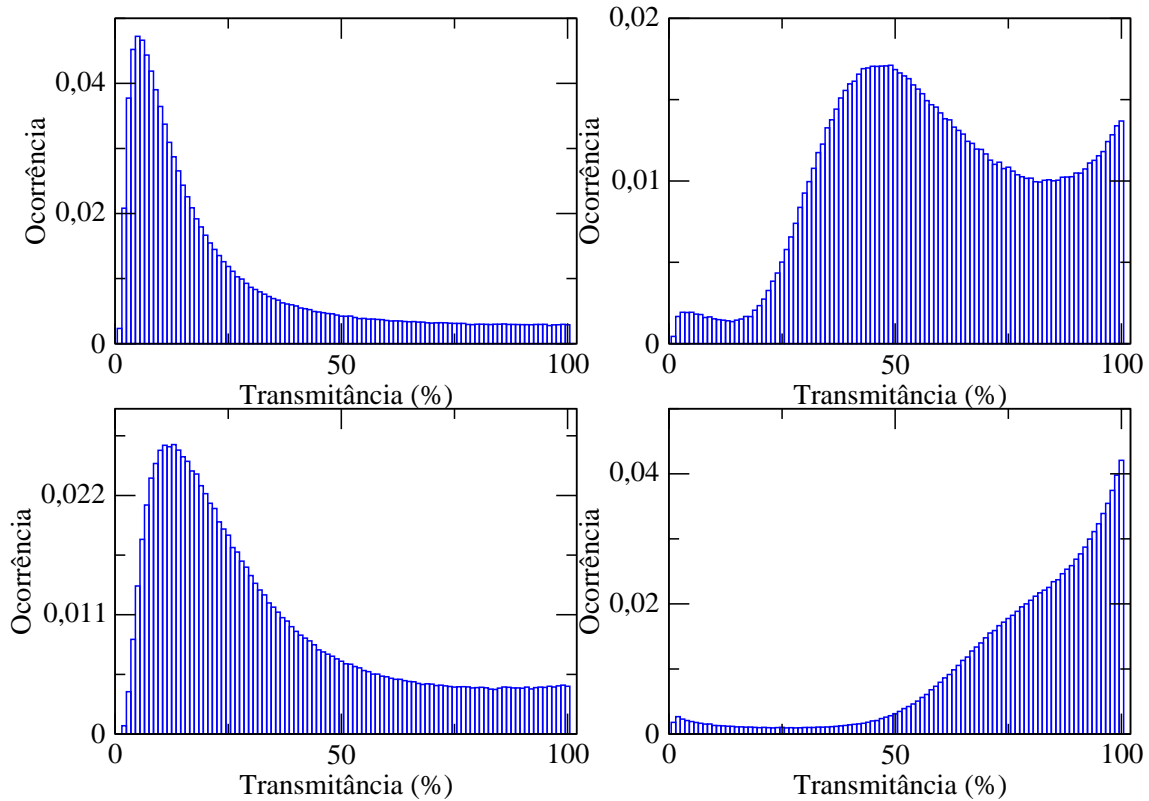


Figura 6.5: Distribuições de transmitâncias para variação estrutural no modelo composto por 30 barreiras. Variações aleatórias da largura e distância entre as barreiras. O *ensemble* foi composto por 1500000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.99$, no segundo $E = 11.00$, no terceiro $E = 19.10$ e no último, $E = 19.20$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).

O outro tipo de desordem bastante comum em sistemas reais é a presença de átomos de um material diferente espalhados aleatoriamente pela rede cristalina. No modelo simplificado este tipo de desordem está relacionada à variação aleatoriamente do potencial de cada barreira. Será investigado agora qual o efeito deste tipo de desordem sobre as características da transmissão eletrônica. De maneira análoga ao caso anterior, considera-se a energia de cada barreira uma variável aleatória com densidade de probabilidade uniforme no intervalo $[V \pm \delta V_{max}]$. Como antes, δV_{max} mede o grau de desordem presente no sistema. Para realizar as simulações será escolhido $\delta V_{max} = 2.5 \times 10^{-1}$ unidades de energia, lembrado que as unidades são tais que $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$. Os histogramas para alguns valores de energia do elétron incidente podem ser visto na figura 6.6.

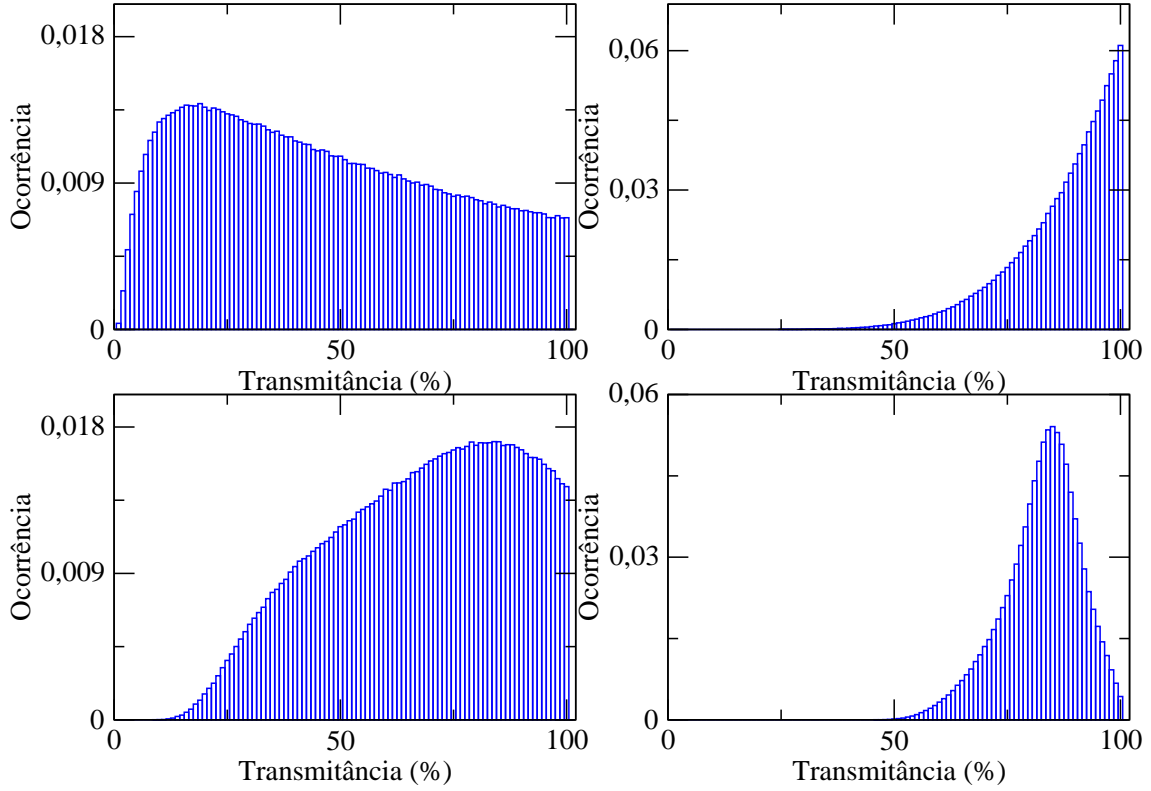


Figura 6.6: Distribuições de transmitâncias para desordem composicional no modelo composto por 30 barreiras. Variações aleatórias da altura das barreiras. O *ensemble* foi composto por 1500000 sistemas. A energia do elétron incidente é fixa em cada quadro. No primeiro quadro $E = 10.1$, no segundo $E = 10.2$, no terceiro $E = 10.9$ e no ultimo, $E = 11.0$ unidades de energia (ligeiramente acima da energia das barreiras, $V = 10$).

Conforme verificado, em determinadas situações as desordens estrutural e composicional têm efeitos semelhantes sobre a transmissão eletrônica. Mais especificamente, quando o sistema encontra-se definitivamente no regime localizado ($l \gg \lambda$) ou no regime balístico ($l \ll \lambda$) os histogramas que caracterizam a transmissão eletrônica nos dois casos têm a mesma forma. Nestes casos, a distribuição de transmitâncias pode ser determinada completamente conhecendo-se apenas o valor médio da transmitância, ou seja, a transmitância média é o único parâmetro relevante na determinação das propriedades de transporte eletrônico. Entretanto, em regimes intermediários ($\sim \lambda$) já não se pode dizer que os histogramas são semelhantes, e diferentes tipos de desordem têm efeitos bastante diferentes sobre as propriedades de transporte eletrônico destes sistemas. Isto significa que já não é mais possível caracterizar o transporte do sistema apenas através da média da transmitância; é necessário conhecer-se a distribuição completa de transmitâncias.

A discussão acima pode ser exemplificada escolhendo-se situações em que $\langle T \rangle$ tem o mesmo valor para diferentes tipos de desordem. A figura 6.7 mostra histogramas da transmitância com desordem estrutural e

composicional correspondentes ao mesmo valor médio de transmitância. Nota-se que, quando a transmitância é muito alta ou muito baixa, os histogramas têm a mesma forma independente do tipo de desordem. Em situações intermediárias as formas diferem bastante para os dois tipos diferentes de desordem.

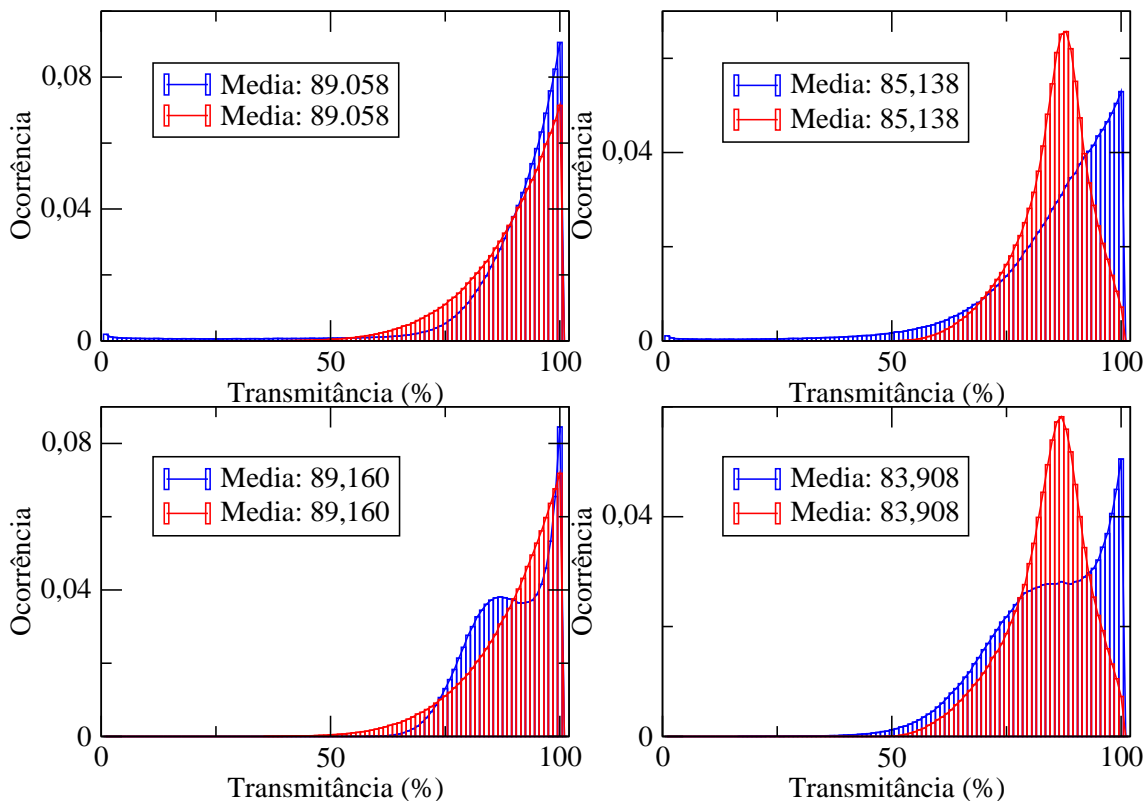


Figura 6.7: Distribuições de transmitâncias com a mesma média, para desordem composicional e estrutural no modelo composto por 30 barreiras. O *ensemble* foi composto por 1500000 sistemas. No primeiro quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 19.32$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 14.38$. No segundo quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 18.03$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.65$. No terceiro quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 16.80$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.65$. No quarto quadro, o histograma em azul possui desordem estrutural, com $E = 16.48$. O histograma em vermelho possui desordem composicional, com $E = 17.53$.

Capítulo 7

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foram estudadas as propriedades de transmissão de um sistema quântico unidimensional. Para entender como se dá o transporte eletrônico em um sólido, usou-se um modelo físico para descrever o sólido e a propagação do elétron. Notou-se que o sólido pode ser visto como um sistema composto por um arranjo periódico de átomos. Foi visto que o movimento dos elétrons de valência é determinado pelas soluções da equação de Schrödinger para estes potenciais. Foram explicadas as situações nas quais o sólido se comporta como isolante, condutor ou semi-condutor.

No passo seguinte, foi discutido e definido um modelo para representar o nanofio, explicando como se dá propagação dos elétrons neste nanofio. Foi introduzido os modelos baseados em potenciais constantes por partes e as soluções da equação de Schrödinger correspondente a cada um deles. Estes modelos foram:

- degrau de potencial;
- barreira de potencial;
- dupla-barreira de potencial;
- múltiplas barreiras de potencial.

No modelo de degrau de potencial, uma característica diferente do que seria esperado no caso clássico foi a de que a onda pôde penetrar ligeiramente na região classicamente proibida, antes de ser totalmente refletida. Com o modelo da barreira de potencial e o modelo da dupla-barreira de potencial, foi visto que a transmitância tem comportamento oscilatório para valores de energias acima do potencial da barreira. Isso se dá devido ao fato de que a onda eletrônica sofre interferências quânticas ao ser refletida múltiplas vezes entre as barreiras. Para valores de energia abaixo do potencial da barreira, viu-se a existência de tunelamento.

Esse fenômeno quântico permite que a partícula tenha uma probabilidade de atravessar a barreira, o que seria impossível classicamente.

Nos sistemas de múltiplas barreiras pôde-se analisar o aumento da quantidade de oscilações do coeficiente de transmissão devido a novas interferências sofridas pela onda eletrônica, para valores de energia acima do potencial da barreira. Para valores de energia inferiores ao potencial, foi visto o surgimento de novos níveis de energia permitidos. Isto permitiu relacionar modelos simples de potenciais unidimensionais com as propriedades de transporte eletrônico.

Com a análise da distribuição de condutâncias, foram estudados sistemas na presença de desordem estrutural e composicional.

Como sugestão para futuros trabalhos, poderia-se expandir a dimensão espacial do modelo para duas ou três dimensões, o que possibilitaria o estudo de uma enorme variedade de características. Para que o desempenho das simulações de duas e três dimensões seja satisfatório, provavelmente teria que ser implementado um algoritmo paralelo para o problema.

Referências Bibliográficas

- [Cohen (1997)] Cohen-Tannoudji, C. **Quantum Mechanics** Wiley Intersciencie, France, 1977
- [Ebbesen (1996)] Ebbesen, Thomas W. **Physics Today**. Junho de 1996, p.26-32.
- [Feynman (1997)] Feynman, Leighton and Sands. **The Feynman Lectures on Physics - Quantum Mechanics, vol.III** Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1966
- [French (1993)] French. A. P. **An Introduction to Quantum Physics** Chapman and Hall, England, 1993
- [Kittel (1996)] Kittel, C. **Introduction to Solid State Physics**. Cambridge, Wiley,1996. p.1-197.
- [Metcalf (1999)] Metcalf, M. and Reid, J. **Fortran 90/95 explained**. Oxford, New York, 1999, 2^a edição.
- [Nazareno (1986)] Nazareno, Hugo N. **Mecânica Estatística e Funções de Green**. Universidade de Brasília, 1986, p.12.
- [Neil (1976)] Neil W. Ashcroft and David N. Mermin. **Solid State Physics** W.B. Saunders Company, Philadelphia, 1976
- [Nussenzveig (2002)] Nussenzveig, H. M. **Curso de Física Básica** Editora Edgar Blücher Ltda, São Paulo, 2002
- [Shive (1972)] Shive, J. N. **A Física da Eletrônica do Estado Sólido**. São Paulo, Edgard Blücher,1972. p.1-30.
- [Datta (1997)] Supriyo Datta. **Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering** Cambridge University Press, Cambridge, 1997, vol. 3
- [Tipler (2001)] Tipler, P. A. **Física Moderna**. LTC Editora, Rio de Janeiro, 2001, 3^a edição.