

Relatório final- bolsa Pibic/CNPq

Projeto: Introdução à Física de Nanoestruturas

Período: agosto/2006 a julho/2007

Depto: LAS – Laboratório de Materiais e Sensores

Aluna: Vânia Aparecida da Costa

Orientador: Erasmo Assumpção de Andrada e Silva

Resumo das atividades

- Primeiro semestre

No primeiro trimestre de execução do projeto foi estudada a necessidade do desenvolvimento da teoria quântica. Para tanto, foram discutidos alguns tópicos de física moderna, usando como referência os capítulos 7 e 8 do volume 4 do Curso de Física do prof. M. Nussensveig e também os capítulos IV e V do livro “Física Atômica” de M. Born.

No segundo trimestre foram introduzidos os conceitos da teoria quântica, usando como referência os capítulos 8,9 e 10 do livro do Prof. M. Nussensveig. Para fixação da teoria estudada, foi resolvida a maior parte dos problemas propostos nesses capítulos.

A metodologia utilizada na execução do projeto foi: realização de visitas semanais ou quinzenais ao orientador para discussão das soluções dos problemas propostos, bem como a discussão da teoria estudada no período.

Com base no estudo realizado foi escrito o texto que segue em anexo “Estudo dirigido de mecânica quântica”, o qual foi devidamente corrigido e discutido juntamente com o orientador. Para a elaboração desse texto houve a necessidade de utilizar outras referências bibliográficas além das propostas no projeto, o que levou a uma melhor compreensão dos tópicos abordados.

A principal dificuldade encontrada nesta etapa do trabalho foi organizar as informações apresentadas nos livros de modo a selecionar o fundamental para a pesquisa de nanoestruturas semicondutoras, que diz respeito à próxima etapa do projeto.

- Segundo semestre

Foi realizada uma introdução ao cálculo numérico, juntamente com o aprendizado da linguagem de programação Fortran e o programa de tratamento de dados Origin. Também foi estudada a teoria de semicondutores por meio da leitura dos primeiros capítulos do livro do prof. Davies.

Com a teoria estudada e as ferramentas aprendidas foram gerados alguns resultados para poços e fios quânticos de PbTe, os quais são apresentados no documento em anexo “Estudo de poços e fios quânticos de PbTe/PbEuTe”.

A principal dificuldade encontrada nessa fase foi elaboração dos programas para geração de resultados.

São José dos Campos, 18 de julho de 2007.

Índice

1.0	Introdução.....	2
2.0	Tópicos de Física Moderna.....	3
2.1	Radiação Térmica e a hipótese de Planck.....	3
2.2	Efeito fotoelétrico.....	4
2.3	Efeito Compton.....	6
2.4	Modelo atômico de Bohr.....	8
2.5	As ondas de De Broglie.....	10
3.0	Formulação Matemática da Mecânica Quântica.....	11
3.1	A equação de Schrödinger.....	11
3.2	A dualidade onda-partícula e a interpretação probabilística.....	13
3.3	Conceitos da teoria quântica.....	14
3.3.1	Observável e operador hermiteano.....	19
3.3.2	Observações incompatíveis e o princípio da incerteza.....	21
3.3.3	O operador hamiltoniano.....	23
3.3.4	A derivada temporal e o valor médio.....	24
3.3.5	Operadores posição e momento.....	24
3.3.6	O teorema de Ehrenfest.....	25
3.3.7	Densidade de Corrente de Probabilidade.....	26
4.0	Estudo de alguns sistemas quânticos simples.....	27
4.1	O degrau de potencial.....	27
4.2	Partícula numa caixa unidimensional.....	30
4.3	Partícula confinada por um poço de potencial retângulo limitado à direita por uma barreira impenetrável.....	31
5.0	Conclusão.....	33
6.0	Bibliografia.....	34

2.2 Introdução

A mecânica, baseada nas leis de movimento de Newton, resistiu a alterações durante séculos, do mesmo modo que a teoria ondulatória da luz baseada na teoria eletromagnética. Em 1900, ocorreu uma revolução científica iniciada com Max Planck com a proposta da quantização da energia.

Usando as idéias de Planck, Einstein em 1905 mostrou que, na interação com a matéria, a luz tem comportamento corpuscular.

Na tentativa de tentar explicar o espectro do átomo de hidrogênio, foram construídos modelos da estrutura atômica. Bohr então propõe a existência de estados estacionários para o elétron e a quantização do momento angular.

Em 1923, De Broglie propõe uma teoria segundo a qual as ondas poderiam ser associadas a objetos como os elétrons. Em seqüência a essa proposta, Schrodinger deu uma das formulações matemáticas para a teoria quântica.

Neste texto é apresentado um estudo dirigido da mecânica quântica. Para compreensão da necessidade do desenvolvimento dessa teoria foram discutidos alguns tópicos de física moderna.

Os conceitos da teoria quântica foram apresentados utilizando-se como exemplo os estados de polarização da luz, pois a polarização de um feixe pode ser descrita em termos de um pequeno número de variáveis, o que torna a descrição quântica bem mais simples.

Os exemplos colocados ao longo do texto são resoluções dos problemas propostos no livro do M. Nussensveig, os quais foram úteis para ilustrar a teoria apresentada.

2.0 Tópicos de Física Moderna

Para estudar mecânica quântica faz-se necessário compreender os fenômenos que levaram à elaboração dessa teoria. Deste modo nesta etapa do trabalho foram estudadas a radiação térmica, o efeito fotoelétrico, o efeito Compton, o modelo de Bohr e as ondas de De Broglie.

2.1 Radiação térmica e a hipótese de Planck

A radiação térmica é a radiação emitida por um corpo em decorrência do fato do mesmo se encontrar a uma dada temperatura T , essa temperatura é denominada temperatura de equilíbrio térmico.

Existe um tipo de corpo, o corpo negro, cujo espectro de radiação independe da forma e do material do qual é composto, mas depende bastante da temperatura.

A primeira alteração fundamental nas idéias da física clássica tornou-se evidente em meados do século XIX com as descobertas dos físicos Rayleigh e Jeans a respeito da radiação de corpo negro.

Rayleigh e Jeans dedicaram-se ao estudo do espectro do corpo negro fazendo o cálculo da densidade de energia da radiação de corpo negro, a qual mostrou uma séria divergência entre a física clássica e os resultados experimentais.

Segundo seus cálculos as vibrações de alta frequência teriam que possuir uma quantidade infinita de energia.

Na figura 2.1, pode ser observada a distribuição espectral da radiação térmica.

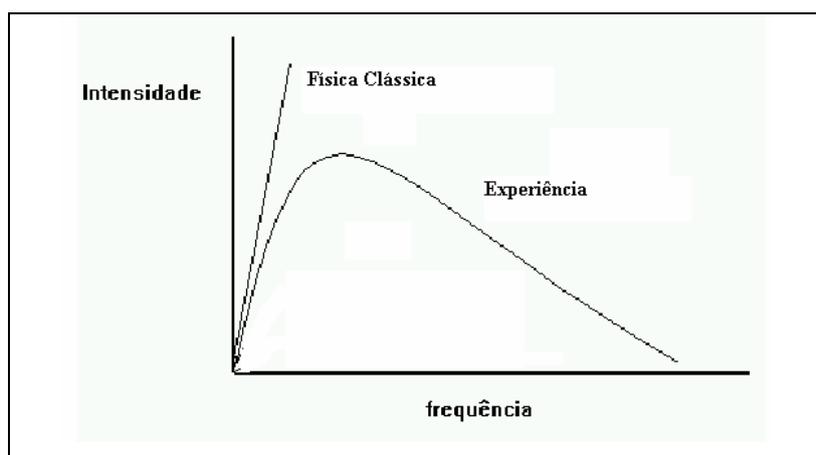


Figura 2.1 Distribuição espectral da radiação térmica.

Pela figura pode-se notar que a previsão clássica concorda muito bem com a experiência para baixas frequências, no entanto como a intensidade cresce como uma potência da frequência, a

energia total emitida pela cavidade é infinita. Esse resultado foi designado catástrofe do ultravioleta.

Cerca de um ano após a publicação dos cálculos de Rayleigh e Jeans, nos quais foi suposto que a energia entrava e saía do corpo negro de forma contínua., Max Planck propôs uma solução peculiar para o problema.

Planck propôs que a emissão e a absorção da energia radiante só poderia ser verificada sob a forma de pacotes de energia, os quais designou *quanta*. Esses seriam dados por múltiplos inteiros de $h\nu$, onde h é a chamada constante de Planck.

2.2 Efeito fotoelétrico

Em 1887 Hertz realizou experimentos com o objetivo de comprovar a teoria eletromagnética de Maxwell.

O experimento consistia em produzir uma descarga oscilante fazendo saltar uma faísca entre dois eletrodos, para gerar ondas. Essas ondas eram detectadas por meio de uma antena ressonante e essa detecção era acompanhada de uma faísca entre eletrodos.

Neste experimento foi observado que a faísca de detecção saltava com mais dificuldade quando os eletrodos da antena receptora não estavam expostos à luz.

Assim foi descoberto o efeito fotoelétrico, uma das primeiras evidências experimentais da quantização.

Em 1899 Lenard realizou o experimento esquematizado na figura 2.2. Neste experimento a luz atinge o catodo C que está inserido dentro de uma ampola em alto vácuo e provoca a emissão de elétrons. O número de elétrons que atingem o anodo A é medido pela corrente no amperímetro.

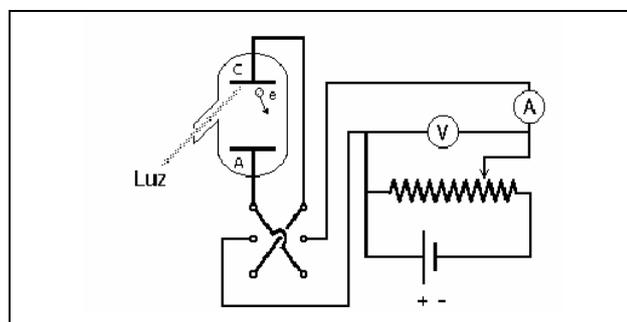


Figura 2.2 Esquema do aparelho utilizado para investigar o efeito fotoelétrico.

Os principais resultados observados para intensidade e frequência fixos num dado material foram:

- todos os fotoelétrons arrancados pela luz são coletados pelo ânodo quando a diferença de potencial é positiva, correspondendo a uma corrente de saturação.
- quando a polaridade da voltagem é invertida, procurando frear os elétrons em lugar de acelerá-los, a corrente continua passando no mesmo sentido, mas vai diminuindo à medida que o potencial aumenta, até que se anula para $V = -V_0$.
- quando a intensidade aumenta o aspecto da curva permanece o mesmo, ou seja, o número de fotoelétrons cresce, mas o potencial de frenamento continua o mesmo, conforme é mostrado na figura 2.3. No entanto, quando a frequência da luz incidente é aumentada, o potencial de frenamento muda. Esse potencial também muda para cada tipo de material.

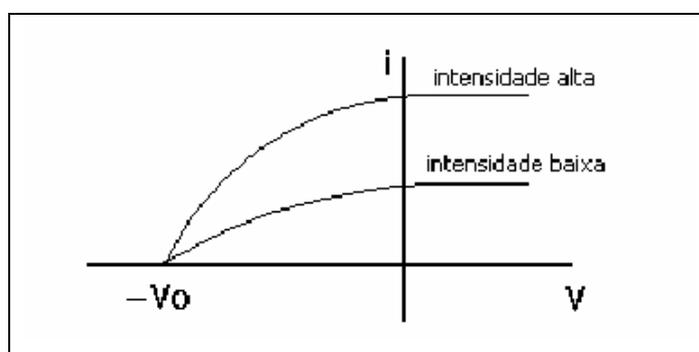


Figura 2.3 Corrente elétrica i contra voltagem V , para dois valores de intensidade da luz.

A tabela 2.1 mostra as características esperadas segundo a teoria clássica e as observadas experimentalmente pelo estudo do efeito fotoelétrico.

Teoria Clássica	Efeito fotoelétrico
<ul style="list-style-type: none"> • Não existe limite para a energia cinética máxima dos fotoelétrons • A energia cinética dos elétrons deveria aumentar quando a intensidade da radiação aumenta. • Os fotoelétrons precisam de um certo tempo para absorver a energia da radiação incidente antes de ter energia suficiente para escapar do material • O efeito fotoelétrico ocorre em qualquer frequência. 	<ul style="list-style-type: none"> • Existe uma energia cinética máxima eV_0. • A energia cinética independe da intensidade da radiação incidente. • Ocorre instantaneamente não existe tempo mínimo para absorção da energia da radiação incidente. • Depende da radiação incidente, pois existe uma frequência de corte, abaixo da qual o efeito fotoelétrico não ocorre.

Tabela 2.1 Quadro comparativo entre previsões clássicas e os resultados observados pelo efeito fotoelétrico.

Em 1905 Einstein serviu-se das idéias de Planck para interpretar aquilo que se revelou como classicamente inexplicável dentro do efeito fotoelétrico.

Foi sugerido que a luz na interação com a matéria se comporta como corpúsculos de energia, sendo a energia dos mesmos, proporcional a freqüência, ou seja, $E = h\nu$.

Segundo Einstein, a idéia mais simples seria supor que um quantum de luz transfere toda a sua energia a um único elétron. Deste modo temos que a energia cinética máxima para o elétron é dada por:

$$K = h\nu - W = eV_0 \quad (1)$$

Esta equação é chamada equação de Einstein para o efeito fotoelétrico, onde $h\nu$ é a energia cinética do fóton incidente, e W é o trabalho necessário para remover o elétron.

Quando $K=0$ é obtido o limiar de freqüência abaixo do qual o efeito fotoelétrico não ocorre:

$$\nu_0 = \frac{W}{h} \quad (2)$$

2.3 O efeito Compton

Entre 1919 e 1923 foi obtida a evidência mais direta das propriedades corpusculares da luz por Arthur H. Compton, por meio da observação do espalhamento de raios x monocromáticos por um alvo de grafita.

Ao fazer a análise espectral dos raios x espalhados em diversos ângulos, foi encontrada uma componente de mesmo comprimento de onda λ que a radiação incidente e outra de comprimento $\lambda' > \lambda$, onde o valor de λ' variava com o ângulo de espalhamento.

Para explicar estes resultados Compton tratou os raios x em termos de fótons. Deste modo o espalhamento foi tratado como uma colisão entre um fóton e um elétron. A cinemática do efeito Compton pode ser observada na figura 2.4.

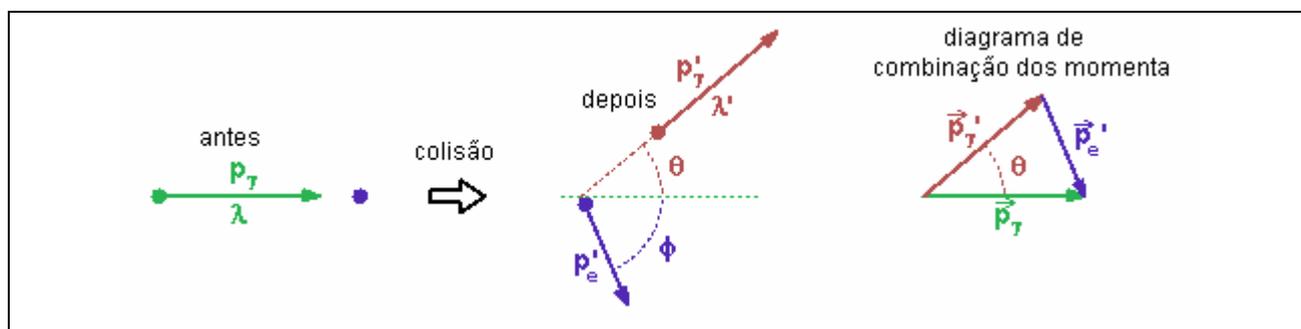


Figura 2.4: Cinemática do efeito Compton

Tem-se que a energia relativística de uma partícula com velocidade v , é dada por:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (3)$$

O momento relativístico é dado por:

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4)$$

Quadrando as equações 3 e 4 e substituindo 4 em 3, pode-se escrever a energia relativística em termos do momento:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2 \quad (5)$$

Antes da colisão o momento do fóton tem módulo p_γ , sendo a energia correspondente E_γ e o comprimento de onda λ . O momento inicial do elétron é $p_e=0$ e, portanto a energia correspondente é $E = m_e c^2$ (energia de repouso do elétron). Após a colisão, o momento do fóton tem módulo p_γ' , e faz um ângulo θ com a direção do movimento do fóton incidente. A energia correspondente é E_γ' e o comprimento de onda é λ' . O elétron atingido recua com momento p_e' , numa direção fazendo um ângulo Φ com a direção de movimento inicial do fóton, a sua energia é $E_e' = K + m_e c^2$.

Da conservação da energia temos:

$$E_\gamma + m_e c^2 = E_\gamma' + E_e' \quad (6)$$

Da relação de Einstein, tem-se que $E = h\nu$, portanto a equação 6 fica:

$$\begin{aligned} h\nu + m_e c^2 &= h\nu' + K + m_e c^2 \\ K &= h(\nu - \nu') \end{aligned} \quad (7)$$

Escrevendo a equação 7 em termos do momento, já que $p = E/c$ e $E = h\nu$, temos:

$$K = c(p_\gamma - p_\gamma') \quad (8)$$

Da conservação do momento temos:

$$p_\gamma = p_\gamma' \cos\theta + p_e \cos\phi \quad (9)$$

$$p_\gamma' \sin\theta = p_e \sin\phi \quad (10)$$

Quadrando as equações 9 e 10 e somando tem-se:

$$p_\gamma^2 - 2p_\gamma p_\gamma' \cos\theta + p_\gamma'^2 = p_e^2 \quad (11)$$

Para o elétron têm-se:

$$\begin{aligned} E_e'^2 &= m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2 \\ (K + m_e c^2)^2 &= m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2 \end{aligned} \quad (12)$$

Substituindo a equação 8 e 11 na 12 e manipulando devidamente os termos, tem-se:

$$p_{\gamma} - p_{\gamma'} = \frac{p_{\gamma} p_{\gamma'}}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (13)$$

Como $p = h/\lambda$, têm-se:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (14)$$

$\lambda_e = \frac{h}{m_e c}$, é o chamado comprimento de onda Compton para o elétron.

2.4 O modelo atômico de Bohr

A espectroscopia desempenhou um importante papel no desenvolvimento da teoria quântica, devido ao fato de se tratar de um ramo da física capaz de alcançar enorme precisão nas medições.

Em 1885, Balmer observando o espectro do átomo de hidrogênio, descobriu um relacionamento numérico entre as frequências das linhas visíveis do espectro. As frequências foram dadas pela equação:

$$\nu_n = cR_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, \dots) \quad (15)$$

onde R_H é a chamada constante de Rydberg para o hidrogênio.

Em 1906 Lyman descobriu outra série de linhas no ultravioleta distante, dada pela equação:

$$\nu_n = cR_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, \dots) \quad (16)$$

Em 1908 Paschen descobriu outra série do hidrogênio no infravermelho, dada pela equação:

$$\nu_n = cR_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, \dots) \quad (17)$$

Todas essas séries podem ser escritas de forma geral como:

$$\nu_{n(m)} = cR_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = m+1, m+2, \dots) \quad (18)$$

Na tentativa de interpretar o espectro do átomo de hidrogênio, foram construídos modelos da estrutura do átomo.

Nos primeiros anos do século XX, J.J. Thomson propôs que as cargas positivas estariam distribuídas uniformemente dentro de uma esfera com as dimensões do átomo e os elétrons estariam dentro dessa nuvem positiva.

Anos mais tarde, Rutherford estudou o espalhamento das partículas α provocado pelos átomos de uma lâmina delgada de ouro.

Se o modelo proposto por Thomson estivesse correto as partículas α só seriam moderadamente defletidas. No entanto o resultado observado foi que um número considerável de partículas α alterava o seu movimento com ângulos acentuados, ou melhor, se retroespalhavam.

Deste modo ficou evidenciado que as cargas positivas estariam concentradas num objeto pontual situado no centro do átomo. Assim foi descoberto o núcleo, ficando obsoleto o modelo atômico de Thomson.

Foram considerados então, modelos atômicos dinâmicos do tipo sistema planetário, mas estes apresentaram problemas dentro da física clássica, pois de acordo com a teoria de Maxwell uma carga acelerada emite radiação e assim perde energia, tendendo a aproximar-se do núcleo. A órbita se transforma em uma espiral levando a captura dos elétrons pelo núcleo e ao colapso do átomo.

Bohr percebendo que a teoria clássica não poderia explicar a estabilidade do átomo em seu estado normal, com o elétron orbitando em torno do núcleo sem emitir radiação, resolveu postulá-la, admitindo a existência de estados estacionários com essas características.

O modelo de Bohr pode ser deduzido a partir das seguintes hipóteses:

- i) Os elétrons podem ocupar apenas certos estados especiais ao redor do núcleo, chamados estados estacionários.
- ii) Os estados estacionários são aqueles que satisfazem a condição de quantização do momento angular $L = n\hbar$.
- iii) Quando o elétron passa de um estado estacionário E_n para outro de energia E_m , a diferença de energia correspondente a emissão de um fóton, se $E_n > E_m$, é dada por:

$$\nu_{n \rightarrow m} = \frac{(E_n - E_m)}{h} \quad (19)$$

Para descrever quantitativamente o modelo, foi feita uma analogia com o problema de Kepler, num caso particular para órbitas circulares, conforme esquematizado na figura 2.5.

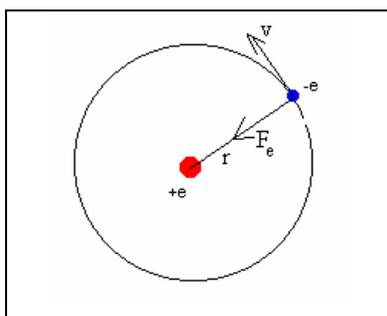


Figura 2.5: Órbitas circulares

A equação para a energia cinética (E_c) e energia potencial (E_p) do elétron localizado a uma distância r do núcleo atômico é dada por:

$$E = E_c + E_p$$

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (20)$$

Do equilíbrio entre a força elétrica (F_e) e a força centrípeta (F_c) têm-se:

$$F_e = F_c$$

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (21)$$

Substituindo 21 em 20 tem-se:

$$E = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (22)$$

Como v é perpendicular a r , o momento angular é dado por $L = mvr$. Da lei de quantização do momento angular de Bohr, têm-se $L = n\hbar$, onde $\hbar = h/2\pi$. Desta forma pode-se escrever:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 r^2 m} \quad (23)$$

Igualando as equações 21 e 23, tem-se:

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad (24)$$

Para $n=1$, tem-se $r_1 = a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \cong 0,529 \text{ \AA}$ que é conhecido como raio de Bohr.

Substituindo 24 em 22 tem-se a expressão de energia E_n associada à órbita n :

$$E_n = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} \quad n=1,2,\dots \quad (25)$$

2.5 As ondas de De Broglie

Louis De Broglie propôs em 1923 uma teoria segundo a qual as ondas poderiam ser associadas a objetos como os elétrons, que até então tinham sido considerados como partículas puras.

A proposta de De Broglie encontrou apoio na descoberta do fenômeno da difração de elétrons que era o análogo exato da demonstração do caráter ondulatório da luz anunciado por Thomas Young anos antes.

A relação de De Broglie prediz a existência de um comprimento de onda associado a uma “onda de matéria” relacionada com uma partícula material que se desloca com momento p :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (26)$$

A tese de De Broglie foi aperfeiçoada por Schrödinger, que a usou para chegar a uma das formulações matemáticas da mecânica quântica: a Equação de Schrödinger.

3.0 Formulação Matemática da Mecânica Quântica

Nesta etapa do trabalho foi estudado o conjunto de regras da mecânica quântica bem como a formulação matemática da teoria.

3.1 A equação de Schrödinger

Schrödinger preocupou-se em encontrar uma equação para as ondas de matéria de De Broglie, começando pelos estados estacionários, ou seja por partículas de energia E dada.

As relações de De Broglie implicam que a frequência ν da onda e seu número de onda $k = 2\pi/\lambda$, estejam relacionados com a energia e o momento da partícula por:

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= \frac{h}{\lambda} = \hbar k \end{aligned} \quad (27)$$

Para uma partícula livre não relativística de massa m tem-se energia puramente cinética:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (28)$$

A equação de ondas monocromáticas de número de onda k em 3 dimensões é dada por:

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{x}) + k^2\Psi = 0 \quad (29)$$

Usando as equações 27 e 28 é obtido:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (30)$$

A equação 30 é a equação de Schrödinger estacionária para partículas livres não-relativísticas de massa m e energia E .

Considerando o problema não relativístico do movimento de uma partícula de massa m e energia E num campo de forças, associado a energia potencial $V(\mathbf{x})$, tem-se que E é dado por:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (31)$$

Para obter a equação de ondas de De Broglie nesse caso, Schrödinger utilizou a analogia ótico-mecânica que havia sido descoberta por Hamilton.

Segundo Hamilton, a trajetória clássica de uma partícula de energia E num campo de forças de energia potencial $V(x)$ é idêntica a trajetória de um raio luminoso num meio não homogêneo de índice de refração dado por:

$$n(x) = \sqrt{1 - \frac{V(x)}{E}} \quad (32)$$

Para ondas de número de onda reduzido k_0 num meio de índice de refração n , o número de onda no meio é $k = nk_0$. Assim a equação 29 fica:

$$\nabla^2 \Psi(x) + n^2(x)k_0^2 \Psi(x) = 0 \quad (33)$$

onde k_0 é o número de onda na ausência do meio, ou seja, para partículas livres de mesma energia:

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (34)$$

Substituindo 32 em 33 tem-se:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (35)$$

que é a equação de Schrödinger independente do tempo, na presença da energia potencial $V(x)$.

Numa descrição dinâmica a função de onda associada a uma partícula deve depender do tempo. Para uma partícula de energia E essa dependência com o tempo pode ser da forma:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (36)$$

Deste modo tem-se que:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \quad (37)$$

Portanto a equação 35 pode ser escrita da forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (38)$$

Esta corresponde à equação de Schrödinger dependente do tempo. Essa equação, por hipótese, descreve o movimento do elétron, desempenhando um papel análogo ao das equações de Newton na física clássica.

Para determinar a função de onda ψ deve-se conhecer as condições de contorno impostas por cada problema físico, no entanto é necessário compreender o significado físico da função ψ .

3.2 A dualidade onda-partícula e a interpretação probabilística

A dualidade onda-partícula constitui uma propriedade básica da mecânica quântica e consiste na capacidade das partículas de comporta-se ou ter propriedades tanto de partículas como de ondas. A experiência da dupla fenda de Young exemplifica de maneira sensível essa dualidade. Deste modo para discutir o contraste entre o comportamento ondulatório e corpuscular, foram observados os resultados dessa experiência utilizando ondas clássicas, partículas clássicas e elétrons. Os resultados foram observados para um orifício aberto e outro fechado e também com os dois orifícios abertos.

Para o experimento com ondas clássicas, foi observada a existência de interferência. Já para o experimento com partículas clássicas, foi observado que o efeito com ambos os orifícios abertos é a soma dos efeitos de cada orifício isoladamente aberto.

No experimento com elétrons observou-se que estes apresentam características de ondas e de partículas, deste modo os elétrons não podem ser definidos nem como ondas nem como partículas. Entretanto, pode ser inferido que existe uma função de onda $\Psi(x)$, tal que $\Psi_j(x)$ é o seu valor quando somente a fenda j está aberta:

$$P_1(x) = |\Psi_1(x)|^2 \quad (\text{distribuição encontrada quando somente a fenda 1 é aberta})$$

$$P_2(x) = |\Psi_2(x)|^2 \quad (\text{distribuição encontrada quando somente a fenda 2 é aberta})$$

$$P_{12} = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \quad (\text{distribuição encontrada quando ambas as fendas estão abertas})$$

Quando é proposta uma alteração no experimento de Young com elétrons, com o objetivo de verificar por qual das fendas o elétron passa, observa-se que há interferência quando não é possível saber por qual das fendas o elétron passa e não é observada interferência quando é possível distinguir por qual das fendas o elétron passa. Assim pode-se afirmar que caminhos indistinguíveis interferem.

Identificar $\psi(x)$ com a função de onda da equação de Schrödinger, implica que a interpretação física de $\psi(x)$ é uma amplitude de probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x+dx$ e, portanto $P(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx$ é a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo considerado.

Para um melhor entendimento da interpretação probabilística da função de onda convém utilizar a teoria ondulatória e corpuscular da luz.

Sabe-se da teoria ondulatória da luz que a energia por unidade de volume do feixe de luz (intensidade) é proporcional ao quadrado da amplitude da onda luminosa.

Considerando que o feixe de luz é constituído por fótons se propagando com a velocidade da luz, a densidade de energia será igual ao número de fótons por unidade de volume multiplicada pela

energia de cada fóton. Deste modo pode-se afirmar que o quadrado da amplitude da onda luminosa é proporcional ao número de fótons por unidade de volume.

Um feixe de elétrons será semelhante a um feixe de luz, assim, aos fótons correspondem os elétrons e a onda luminosa corresponde a função ψ . Portanto o produto $\Psi\Psi^* = |\Psi|^2$ é a probabilidade de encontrar um elétron na unidade de volume considerada (densidade de probabilidade)

De forma resumida, a função de onda representa as possibilidades do que pode acontecer num determinado sistema físico e a densidade de probabilidade dá a probabilidade por unidade de volume, num determinado instante de tempo, de cada uma das possibilidades representadas por ψ .

3.3 Conceitos da teoria quântica.

Para a explanação dos conceitos e princípios básicos da teoria quântica o comportamento da luz é de grande utilidade.

Uma das propriedades da luz é a polarização, em termos ondulatorios isto corresponde à direção na qual se verificam as oscilações. A polarização pode ser descrita em termos de um número pequeno de variáveis, deste modo a descrição quântica torna-se bem mais simples.

Primeiramente serão considerados estados de polarização linear (vibração da onda sempre na mesma direção).

Um filtro de polarização linear é constituído de um polarizador e um analisador, conforme esquematizado na figura 3.1.

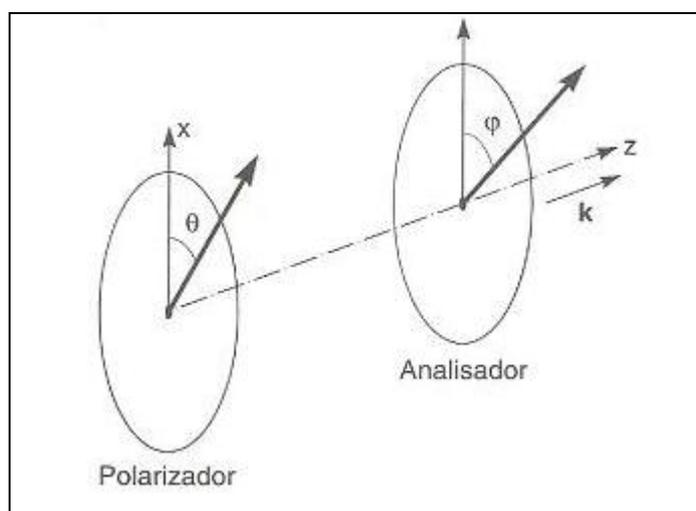


Figura 3.1: Esquema do filtro de polarização linear.

Em um filtro ideal a razão entre as intensidades provenientes do analisador e polarizador é dada pela Lei de Malus:

$$I/I_0 = \cos^2(\theta - \varphi) \quad (39)$$

Quando os eixos do polarizador e do analisador estiverem alinhados ($\theta = \varphi$) toda a intensidade da luz incidente passa, e quando os eixos estiverem cruzados ($\varphi = \pm \pi/2$) a intensidade é bloqueada.

A intensidade do feixe incidente é proporcional ao número de fótons, logo a equação 39 deveria apresentar a fração do número de fótons incidentes sobre o analisador que é transmitida por ele. Entretanto não pode ser transmitida uma fração de fótons: ou o fóton passa ou não passa. Deste modo uma maneira de interpretar a Lei de Malus seria como a probabilidade de um fóton preparado no estado de polarização θ atravessar um analisador que seleciona fótons de polarização φ :

$$P(\varphi, \theta) = \cos^2(\theta - \varphi) \quad (40)$$

Mas sabe-se que:

$$\cos(\theta - \varphi) = \cos\theta \cos\varphi + \text{sen}\theta \text{sen}\varphi \quad (41)$$

A equação 41 pode ser escrita como um produto de vetores linha e coluna, onde o vetor linha estaria associado ao estado de polarização do fóton transmitido φ e o vetor coluna estaria associado ao estado de polarização do fóton incidente θ . Assim tem-se:

$$\cos(\theta - \varphi) = (\cos\varphi \text{sen}\varphi) \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \text{sen}\theta \end{pmatrix} \quad (42)$$

Utilizando a notação de Dirac para representar os vetores de estado (vetor linha e vetor coluna da equação 42), tem-se:

$$|\theta\rangle \equiv \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \text{sen}\theta \end{pmatrix} \quad \text{estado de polarização associado ao fótons incidente} \quad (43)$$

$$\langle\varphi| \equiv (\cos\varphi \text{sen}\varphi) \quad \text{estado de polarização do fóton transmitido} \quad (44)$$

Um estado geral de polarização pode ser representado por:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \text{com } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (45)$$

Onde c_1 e c_2 são complexos e esta última é chamada condição de normalização.

A condição de normalização indica que há a possibilidade de encontrar a partícula numa região do espaço.

Na notação de Dirac o produto escalar é dado por:

$$\langle \varphi | \theta \rangle = (\cos \varphi \ \text{sen} \varphi) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \text{sen} \theta \end{pmatrix} = \cos(\theta - \varphi) \quad (46)$$

Desta forma a probabilidade de um fóton preparado no estado de polarização linear θ atravessar um analisador que seleciona fótons de polarização φ é:

$$P(\theta, \varphi) = |\langle \varphi | \theta \rangle|^2 \quad (47)$$

Com base na discussão acima pode-se enunciar a primeira regra básica da mecânica quântica:

Regra I: O estado quântico de polarização de um fóton é representado pelo vetor de estado normalizado.

$$|c\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \text{ com } \| |c\rangle \|^2 = \langle c | c \rangle = 1 \quad (48)$$

Para um fóton preparado num estado de polarização qualquer, somente pode-se prever a probabilidade de ele passe pelo analisador. Baseado nisso pode-se descrever a segunda regra básica:

Regra II: Se um fóton é preparado num estado de polarização $|a\rangle$, a probabilidade de que seja observado com a polarização $|b\rangle$ numa observação imediatamente posterior é:

$$P(a, b) = |\langle b | a \rangle|^2 \quad (49)$$

Para ilustrar as regras I e II enunciadas será discutido o seguinte exemplo:

Exemplo 1) Neste exemplo será calculada a probabilidade de transmissão máxima de um feixe de fótons linearmente polarizado na direção x que, incide em seqüência, sobre um par de analisadores de polarização. O primeiro deles tem seu eixo de transmissão máxima orientado segundo um ângulo θ_1 com a direção x , e o segundo tem seu eixo de transmissão máxima orientado segundo um ângulo θ_2 com a direção x .

Considerando que o fóton incidente esteja no estado $|\theta\rangle$ a probabilidade de se observar o fóton com polarização $|\theta_1\rangle$ é dado por:

$$P(\theta_1, \theta) = |\langle \theta_1 | \theta \rangle|^2 \quad (50)$$

onde:

$$|\theta\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \text{sen} \theta \end{pmatrix} \text{ e } \langle \theta_1 | = (\cos \theta_1 \ \text{sen} \theta_1) \quad (51)$$

Deste modo

$$P(\theta_1, \theta) = |\cos \theta_1 \cos \theta + \text{sen} \theta_1 \text{sen} \theta|^2 \quad (52)$$

Se for considerado um fóton incidente de polarização linear $\theta = 0$, a equação 52 fica:

$$P(\theta_1, \theta) = \cos^2 \theta_1 \quad (53)$$

A equação 53 dá a probabilidade do fóton passar pelo analisador 1.

Agora o fóton incidente encontra-se no estado $|\theta_1\rangle$ e a probabilidade de se observar o fóton com polarização $|\theta_2\rangle$ é dada por:

$$P(\theta_2, \theta_1) = |\text{sen}\theta_2 \text{sen}\theta_1 + \text{cos}\theta_2 \text{cos}\theta_1|^2 \quad (54)$$

Neste caso a polarização linear do fóton incidente é diferente de zero. Assim a equação 54 fica:

$$P(\theta_2, \theta_1) = \cos^2(\theta_2 - \theta_1) \quad (55)$$

Assim a probabilidade do fóton passar pelos dois analisadores é dada pelo produto das equações 53 e 55:

$$P = \cos^2 \theta_1 \cos^2(\theta_2 - \theta_1) \quad (56)$$

Considerando θ_2 fixo, é possível verificar para qual valor de θ_1 a probabilidade de transmissão através dos dois analisadores é máxima. Para tanto, pode-se escrever a equação 56 na forma diferencial, assim tem-se:

$$dp = \frac{\partial P}{\partial \theta_1} d\theta_1 + \frac{\partial P}{\partial \theta_2} d\theta_2 \quad (57)$$

Como θ_2 é fixo $\frac{\partial P}{\partial \theta_2}$ é nulo. Para que a probabilidade seja máxima $dp = 0$, então $\frac{\partial P}{\partial \theta_1} = 0$, assim

tem-se:

$$\frac{\partial P}{\partial \theta_1} = -2 \cos\theta_1 \text{sen}\theta_1 \cos^2(\theta_2 - \theta_1) + 2 \cos^2 \theta_1 \text{c os}(\theta_2 - \theta_1) \text{sen}(\theta_2 - \theta_1) = 0 \quad (58)$$

$$-2 \cos\theta_1 \text{cos}(\theta_2 - \theta_1) [\text{sen}\theta_1 \text{cos}(\theta_2 - \theta_1) - \text{cos}\theta_1 \text{sen}(\theta_2 - \theta_1)] = 0 \quad (59)$$

$$\text{sen}\theta_1 \text{cos}(\theta_2 - \theta_1) = \text{cos}\theta_1 \text{sen}(\theta_2 - \theta_1) \quad (60)$$

A equação 60 pode ser escrita como:

$$\tan\theta_1 = \tan(\theta_2 - \theta_1) \quad (61)$$

Para que a igualdade da equação 61 seja válida os argumentos devem ser iguais, portanto:

$$\theta_1 = \theta_2 - \theta_1 \quad (62)$$

Deste modo o ângulo para o qual a probabilidade de transmissão através dos dois analisadores é máxima é dado por:

$$\theta_1 = \frac{\theta_2}{2} \quad (63)$$

Até aqui, na descrição das regras da mecânica quântica foi considerado um espaço vetorial de dimensão 2, devido a utilização do exemplo de polarização da luz.

Esses conceitos podem ser generalizados para um espaço de dimensão infinita. Deste modo o vetor de estado da partícula pode ser escrito como:

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \cdot \\ c_{n-1} \\ c_n \\ c_{n+1} \\ \cdot \end{pmatrix}, \quad |\varphi\rangle = \sum_n c_n \Phi_n \quad (64)$$

O número c_n representa a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula no estado Φ , e

condição de normalização ($\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$):

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (65)$$

O produto escalar de dois vetores de estado $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$, associados às amplitudes de densidade de probabilidade $\varphi(x)$ e $\psi(x)$ é dado por:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\psi(x)dx \quad (66)$$

Em geral numa descrição dinâmica a função de onda associada a uma partícula deve depender do tempo t : $|\psi\rangle \rightarrow \psi(x, t)$.

Um vetor de estado pode ser representado como a superposição dos vetores da base. Para um espaço de dimensão 2 tem-se:

$$|c\rangle = c_1|e_1\rangle + c_2|e_2\rangle \quad (67)$$

$$c_1 = \langle e_1|c\rangle \quad \text{e} \quad c_2 = \langle e_2|c\rangle$$

onde, c_1 e c_2 são as componentes do vetor coluna:

$$|c\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (68)$$

Este é o chamado princípio da superposição da mecânica quântica. Toda combinação linear de estados possíveis de um sistema físico é também um estado possível do sistema.

3.3.1 Observável e operador hermiteano

Uma grandeza física que pode ser medida é um observável. Na mecânica quântica um observável é representado por um operador linear hermiteano.

Regra IIIa: Uma grandeza observável A é representada por um operador hermiteano \hat{A} .

Um operador tal que $\hat{A}^+ = \hat{A}$ é chamado operador hermiteano. Os elementos de matriz do conjugado hermiteano \hat{A}^+ de um operador \hat{A} são:

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^+ | \varphi \rangle \quad (\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle) \quad (69)$$

Numa representação integral a equação 69 fica:

$$\left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) [\hat{A} \psi(x)] dx \right\}^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) [\hat{A}^+ \varphi(x)] dx \quad (70)$$

Trocando $\hat{A} \rightarrow \hat{A}^+$ e usando $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$, tem-se:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) [\hat{A} \varphi(x)] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{A}^+ \psi(x)]^* \varphi(x) dx \quad (71)$$

Cabe aqui um exemplo a respeito dos operadores hermiteanos:

Exemplo 2) Verificação da hermiticidade dos operadores paridade \hat{P} e translação \hat{T} , onde:

$$\hat{P} \varphi(x) = \varphi(-x) \quad \text{e} \quad \hat{T}_a \varphi(x) = \varphi(x+a)$$

Primeiramente será feita a verificação do operador paridade.

Da definição de operador hermiteano, tem-se:

$$\langle \varphi | \hat{P} | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \hat{P}^+ | \varphi \rangle \quad (72)$$

Escrevendo a equação 72 na forma integral tem-se:

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{P} \varphi(x) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{P}^+ \varphi(x) dx \quad (73)$$

Como $\hat{P} \varphi(x) = \varphi(-x)$, a equação 73 fica:

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \varphi(-x) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{P}^+ \varphi(x) dx \quad (74)$$

Portanto:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \varphi^*(-x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{P}^+ \varphi(x) dx \quad (75)$$

Fazendo $-x = y$ e $dx = -dy$, a integral à esquerda da equação 75 pode ser reescrita como:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \varphi^*(-x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(-y) \varphi^*(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(-y) \varphi^*(y) dy \quad (76)$$

Portanto a equação 75 fica:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(-x) \varphi^*(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{P}^+ \varphi(x) dx \quad (77)$$

Comparando os dois lados da equação 77, pode concluir que:

$$\hat{P}^+ \varphi(x) = \varphi(-x) \quad (78)$$

Portanto $\hat{P}^+ = \hat{P}$, demonstrando que o operador paridade é hermiteano.

No caso do operador translação tem-se:

$$\langle \varphi | \hat{T}_a | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \hat{T}_a^+ | \varphi \rangle \quad (79)$$

Na forma integral:

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{T}_a \varphi(x) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{T}_a^+ \varphi(x) dx \quad (80)$$

Como $\hat{T}_a \varphi(x) = \varphi(x+a)$, a equação 80 pode ser reescrita como:

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \varphi(x+a) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{T}_a^+ \varphi(x) dx \quad (81)$$

Portanto:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \varphi^*(x+a) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{T}_a^+ \varphi(x) dx \quad (82)$$

Fazendo $x+a = y$ e $dx = dy$, a integral à esquerda de 82 pode ser escrita como:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \varphi^*(x+a) dx = - \int_{+\infty}^{-\infty} \varphi(y-a) \varphi^*(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x-a) \varphi^*(y) dy \quad (83)$$

Portanto a equação 83 fica:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x-a) \varphi^*(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \hat{T}_a^+ \varphi(x) dx \quad (84)$$

Comparando os dois lados da equação 84 verifica-se que:

$$\hat{T}_a^+ \varphi(x) = \varphi(x-a) \quad (85)$$

Portanto $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a} \neq \hat{T}_a$, demonstrando que o operador translação não é hermiteano.

Outra regra da mecânica quântica relacionada a observáveis é:

Regra IIIb: Os resultados possíveis das observações de A são os autovalores de \hat{A} ou:

$$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle \quad (86)$$

A equação 86 indica que o número λ (autovalor) é o resultado da medida física do observável λ neste estado $|v\rangle$ e a medida \hat{A} não perturba $|v\rangle$. O resultado dessa medida é real, já que os autovalores de um operador hermiteano são reais.

Deste modo pode-se enunciar a seguinte regra:

Regra IIIc: Os estados para os quais A assume com certeza (probabilidade igual a 1) seus valores possíveis λ , são os autovetores (também chamados autoestados) correspondentes de \hat{A} .

E finalmente segue a regra III d, que diz respeito aos valores esperados para observáveis:

Regra III d: O valor esperado (médio) de um observável A num estado $|\psi\rangle$ qualquer é dado por:

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) [\hat{A} \psi(x, t)] dx \quad (87)$$

3.3.2 Observações incompatíveis e o princípio da incerteza

A física quântica tem uma característica radicalmente diferente da física clássica: a determinação simultânea com precisão, de duas grandezas físicas diferentes pode ser incompatível, ou seja, impossível por princípio.

Seja \hat{X} e \hat{Y} dois operadores associados a observáveis e seja a desigualdade abaixo válida para quaisquer operadores \hat{A} e \hat{B} e qualquer estado $|u\rangle$:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle_u \langle \hat{B}^2 \rangle_u \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_u \right|^2 \quad (88)$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}]$ é o comutador dos operadores \hat{A} e \hat{B} definido por:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (89)$$

Tomando na equação 88:

$$\hat{A} = \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle_u \quad \text{e} \quad \hat{B} = \hat{Y} - \langle \hat{Y} \rangle_u \quad (90)$$

e sabendo que uma boa medida da incerteza da observação de uma A grandeza num estado $|u\rangle$ é o desvio quadrático médio $(\Delta A)_u$, definido por:

$$[(\Delta A)_u]^2 \equiv \left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_u \right)^2 \right\rangle_u = \langle u | \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_u \right)^2 | u \rangle \quad (91)$$

têm-se que:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle_u = (\Delta X)_u^2 \quad \text{e} \quad \langle \hat{B}^2 \rangle_u = (\Delta Y)_u^2 \quad (92)$$

e também que:

$$[\hat{X} - \langle \hat{X} \rangle_u, \hat{Y} - \langle \hat{Y} \rangle_u] = [\hat{X}, \hat{Y}] \quad (93)$$

pois, um número sempre comuta com um operador.

Substituindo 92 e 93 na equação 88, tem-se a seguinte relação:

$$\langle \Delta X \rangle_u \langle \Delta Y \rangle_u \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{X}, \hat{Y}] \rangle_u \right| \quad (94)$$

A equação 94 é chamada relação de incerteza: se \hat{X} e \hat{Y} não comutam, não é possível tornar ao mesmo tempo tão pequenas quanto se queira as incertezas em X e Y, qualquer que seja o estado $|u\rangle$ escolhido.

Deste modo pode-se afirmar que a condição necessária e suficiente para que dois observáveis \hat{X} e \hat{Y} sejam compatíveis, isto é, que possam sempre ambos ter valores bem definidos no mesmo estado quântico, é que \hat{X} e \hat{Y} comutem: $[\hat{X}, \hat{Y}] = 0$.

Para ilustrar as definições acima pode-se utilizar o exemplo a seguir:

Exemplo 3) Verificação da comutatividade dos operadores \hat{P}_θ e \hat{P}_φ , onde:

$$\hat{P}_\theta \equiv \begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{P}_\varphi \equiv \begin{pmatrix} \cos^2 \varphi & \cos \varphi \sin \varphi \\ \cos \varphi \sin \varphi & \sin^2 \varphi \end{pmatrix}$$

Para que os operadores comutem deve-se ter:

$$[\hat{P}_\theta, \hat{P}_\varphi] = \hat{P}_\theta \hat{P}_\varphi - \hat{P}_\varphi \hat{P}_\theta = 0 \quad (95)$$

$$\hat{P}_\theta \hat{P}_\varphi = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta \cos^2 \varphi + \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \sin \varphi & \cos^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi + \sin^2 \varphi \cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta \cos^2 \varphi + \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \cos \theta \sin \theta \cos \varphi \sin \varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \end{pmatrix} \quad (96)$$

$$\hat{P}_\varphi \hat{P}_\theta = \begin{pmatrix} \cos^2 \varphi \cos^2 \theta + \cos \varphi \sin \varphi \cos \theta \sin \theta & \cos^2 \varphi \cos \theta \sin \theta + \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi \\ \cos \varphi \sin \varphi \cos^2 \theta + \sin^2 \varphi \cos \theta \sin \theta & \cos \varphi \sin \varphi \cos \theta \sin \theta + \sin^2 \varphi \sin^2 \theta \end{pmatrix} \quad (97)$$

Subtraindo 97 de 98 e manipulando devidamente os termos, tem-se:

$$\hat{P}_\theta \hat{P}_\varphi - \hat{P}_\varphi \hat{P}_\theta = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \sin 2(\theta - \varphi) \\ 1/2 \sin 2(\theta - \varphi) & 0 \end{pmatrix} \quad (98)$$

Para que os operadores comutem a matriz da equação 98 deve ser nula, portanto deve-se ter $\sin 2(\theta - \varphi) = 0$, deste modo pode-se concluir que os operadores \hat{P}_θ e \hat{P}_φ comutam se e somente se:

$$(\theta - \varphi) = \frac{n\pi}{2} \quad (n=1,2,3,\dots) \quad (99)$$

Utilizando o exemplo da polarização da luz para fazer uma interpretação física, pode-se afirmar que um fóton pode ao mesmo tempo ter polarização linear bem definida na direção θ e na direção φ desde que a equação 99 seja satisfeita.

Com a equação 99 satisfeita, um sistema com dois analisadores um na direção θ e outro na direção φ , tem a mesma probabilidade total de passagem do fóton, independentemente da ordem em que os analisadores estejam colocados.

3.3.3 O operador hamiltoniano

O vetor de estado $|\psi\rangle$ descreve o estado de um sistema físico num instante dado. A equação diferencial que determina a evolução do tempo do estado $|\psi\rangle$ é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (100)$$

Os observáveis não dependem explicitamente do tempo, o vetor de estado muda com o tempo segundo a equação 100.

O operador \hat{H} é chamado hamiltoniano e atua diretamente sobre uma função de onda ψ . Esse operador é hermiteano e é definido como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} + V(x)\hat{I} \quad (101)$$

onde \hat{I} é o operador identidade: $\hat{I}|c\rangle = |c\rangle$, para qualquer vetor $|c\rangle$, esse operador comuta com qualquer outro.

O hamiltoniano equivale ao observável energia da partícula.

3.3.4 A derivada temporal e o valor médio

Dado o valor médio de um observável \hat{A} definido conforme a equação 87 e supondo que \hat{A} não contém o tempo explicitamente, o valor médio evolui com o tempo devido a evolução de ψ , o que dá:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi \, dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi - \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{H} \psi)^* \hat{A} \psi \, dx \right\} \end{aligned} \quad (102)$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{\psi} \quad (103)$$

Em particular $\frac{d}{dt} \langle \hat{H} \rangle_{\psi} = 0$, isto garante a conservação do valor médio da energia, já que o hamiltoniano equivale a energia da partícula.

3.3.5 Operadores posição e momento

A interpretação física de $|\psi(x, t)|^2 dx$ como a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x+dx$ no instante t mostra que o valor esperado da posição da partícula nesse instante deve ser dado por:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x} |\psi(x, t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) \, dx = \langle \hat{x} \rangle_{\psi} \quad (104)$$

onde, $\hat{x}\psi(x, t) = x\psi(x, t)$, ou seja o observável $\hat{x} \equiv$ posição da partícula, é um operador equivalente a multiplicação por x .

Para definir o observável \hat{v} da partícula pode-se utilizar o princípio da correspondência, este princípio, permite comparar com a mecânica clássica as equações de movimento para valores médios de observáveis quânticos. Deste modo tem-se:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_{\psi} = \langle \hat{v} \rangle_{\psi} \quad (105)$$

Da derivada temporal definida conforme equação 102, tem-se que:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_{\psi} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle_{\psi} \quad (106)$$

O comutador da equação 106 é dado por:

$$[\hat{x}, \hat{H}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\hat{x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \quad (107)$$

Como $\left[\hat{x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] = -2 \frac{\partial}{\partial x}$, a equação 107 fica:

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} \quad (108)$$

Substituindo 108 em 106, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_{\psi} = \left\langle -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle_{\psi} \quad (109)$$

Comparando a equação 109 com a 105, tem-se:

$$\hat{v} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \quad (110)$$

Fazendo $\hat{p} = m\hat{v}$, tem-se o operador momento:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (111)$$

Assim pode-se obter a regra de comutação de Heisenberg:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (112)$$

Da relação de incerteza da equação 94 tem-se:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (113)$$

A relação dada pela equação 113 é a chamada relação de incerteza de Heisenberg para a posição e o momento de uma partícula.

Pode-se verificar que a posição e o momento de uma partícula são observáveis incompatíveis: não podem ter, ao mesmo tempo, valores bem definidos, em nenhum estado quântico.

3.3.6 O teorema de Ehrenfest

Utilizando o princípio da correspondência tem-se:

$$\langle \hat{p} \rangle_{\psi} = m \langle \hat{v} \rangle_{\psi} = m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_{\psi} \quad (114)$$

Utilizando 103 tem-se:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle_{\psi} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle_{\psi} \quad (115)$$

Como \hat{p} comuta com \hat{p}^2 e $[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial x}, V(x)\hat{1} \right] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$, a equação 115 fica:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle_{\psi} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_{\psi} \quad (116)$$

Este é o teorema de Ehrenfest: a derivada temporal do valor médio do momento linear é medida pelo valor médio da força.

3.3.7 Densidade de corrente de probabilidade

Sabe-se que a probabilidade é conservada, pois:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad (117)$$

Há também outra lei de conservação análoga a equação da continuidade da hidrodinâmica e à conservação da carga elétrica.

Sabe-se que a densidade de probabilidade $\rho(x, t)$ é dada por:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t)\psi(x, t) \quad (118)$$

Assim:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \quad (119)$$

Usando a equação de Schroedinger dependente do tempo (38), a equação 119 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\psi^*}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \right] - \frac{\psi}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^* \right] \quad (120)$$

Portanto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \quad (121)$$

Definindo $j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$ a equação 121 pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (122)$$

no caso tridimensional:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (123)$$

Esta equação representa a lei da conservação da probabilidade.

4.0 Estudo de alguns sistemas quânticos simples

Nesta etapa do trabalho foi feita a resolução de alguns sistemas quânticos com o objetivo de aplicar os conhecimentos adquiridos nos itens anteriores.

4.1 O degrau de potencial

Seja o degrau de potencial mostrado na figura 3.2, onde tem-se: $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \equiv \text{região 1} \\ V, & x > 0 \equiv \text{região 2} \end{cases}$

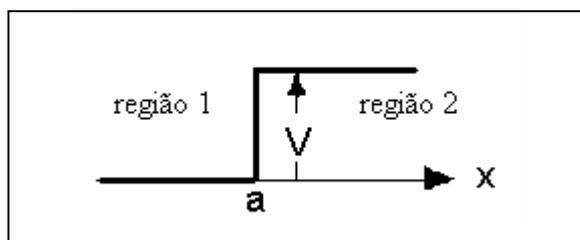


Figura 3.2 degrau de potencial

Neste problema tem-se a seguinte equação de Schrodinger independente do tempo para a região 1:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} = E \varphi_1(x) \quad (124)$$

Já para a região 2 a tem-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V \varphi_2 = E \varphi_2(x) \quad (125)$$

Existem duas situações que devem ser consideradas para a solução das equações diferenciais 124 e 125: $E > V$ e $0 \leq E < V$.

a) Para o caso em que $E > V$ a solução da equação é:

$$\varphi_1 = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \text{ onde } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (126)$$

$$\varphi_2 = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}, \text{ onde } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \quad (127)$$

Considerando que a onda incide da esquerda para a direita tem-se:

$$\varphi_1 = \underbrace{A e^{ik_1 x}}_{\text{incidente}} + \underbrace{B e^{-ik_1 x}}_{\text{refletido}}$$

$$\varphi_2 = \underbrace{C e^{ik_2 x}}_{\text{transmitido}} + \underbrace{D e^{-ik_2 x}}_{D=0 \text{ pois a partícula não retorna}}, \text{ portanto } \varphi_2 = C e^{ik_2 x} \quad (128)$$

Sabe-se que o potencial é descontínuo em $x=0$. Como a solução é estacionária tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t)|^2 = 0 \quad (129)$$

ou seja, a densidade de probabilidade é independente do tempo.

A equação da continuidade em uma dimensão é dada por 122. Integrando ambos os lados dessa equação entre ε e $-\varepsilon$ tem-se:

$$-\frac{d}{dt} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \rho(x, t) dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) dx$$

$$j(\varepsilon, t) - j(-\varepsilon, t) = 0 \quad (130)$$

Portanto tem-se que a corrente de probabilidade deve permanecer contínua na origem. Isto implica que as funções de onda e suas primeiras derivadas devem ser contínuas em $x = 0$:

$$\varphi_1(0_-) = \varphi_2(0_+)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \varphi_1(0_-) = \frac{\partial}{\partial x} \varphi_2(0_+) \quad (131)$$

Assim de 128 tem-se:

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = \frac{k_2}{k_1} C \end{cases} \quad (132)$$

Resolvendo o sistema tem-se:

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_2 + k_1} \quad (\text{amplitude de reflexão}) \quad (133)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_2 + k_1} \quad (\text{amplitude de transmissão}) \quad (134)$$

As probabilidades de reflexão (r) e de transmissão (t) são dadas por:

$$r = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

$$t = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (135)$$

Assim:

$$r = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_2 + k_1} \right)^2$$

$$t = \frac{4k_2 k_1}{(k_2 + k_1)^2} \quad (136)$$

onde, $r + t = 1$

b) Para o caso em que $0 \leq E < V$ tem-se:

Na região 1 a solução da equação de Schroedinger é dada por 126. Já na região 2 a solução da equação é dada por:

$$\varphi_2 = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, \text{ onde } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) \quad (137)$$

Assim, considerando que a onda incide da esquerda para a direita tem-se:

$$\varphi_1 = \underbrace{Ae^{ik_1x}}_{\text{incidente}} + \underbrace{Be^{-ik_1x}}_{\text{refletido}}$$

$$\varphi_2 = \underbrace{Ce^{ik_2x}}_{\substack{\text{não é fisicamente aceitável,} \\ \text{pois vai para infinito.}}} + De^{-ik_2x}, \text{ portanto } \varphi_2 = De^{-k_2x} \quad (138)$$

Como as funções de onda e as primeiras derivadas devem ser contínuas em $x=0$, tem-se o seguinte sistema:

$$\begin{cases} A + B = D \\ A - B = i \frac{k_2}{k_1} D \end{cases} \quad (139)$$

Resolvendo esse sistema tem-se:

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \text{ (amplitude de reflexão)} \quad (140)$$

Assim a probabilidade de reflexão é:

$$r = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 \quad (141)$$

Neste caso tem-se reflexão total.

Se neste problema do degrau de potencial a energia fosse dada por $E < 0$, ou seja $E = -|E|$, as soluções da equação de Schrodinger, seriam dadas por:

$$\varphi_1 = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x}, \text{ onde } k_1^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

$$\varphi_2 = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, \text{ onde } k_2^2 = \frac{2m(V + |E|)}{\hbar^2} \quad (142)$$

Analisando as soluções vê-se que para φ_1 quando $x \rightarrow -\infty$, $Be^{-k_1x} \rightarrow \infty$, então a solução fisicamente aceitável é $\varphi_1 = Ae^{k_1x}$. Para φ_2 , quando $x \rightarrow +\infty$, $Ce^{k_2x} \rightarrow \infty$, então a solução fisicamente aceitável é $\varphi_2 = De^{-k_2x}$.

Em $x=0$, as funções de onda e suas derivadas devem ser contínuas, deste modo tem-se que $A=D$ e, portanto $k_1=-k_2$. Mas sabe-se que $k_1 \neq k_2$, assim, como as condições de contorno em $x=0$ não são satisfeitas, pode-se afirmar que não existem estados estacionários com $E < 0$.

4.2 Partícula numa caixa unidimensional.

Seja uma partícula numa caixa unidimensional, conforme mostrado na figura 3.3, onde tem-se:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a/2 < x < a/2 \\ V, & |x| > a/2 \end{cases}$$

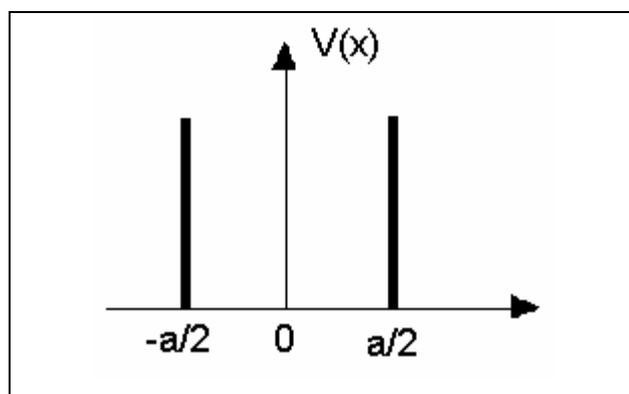


Figura 3.3: Caixa com paredes impenetráveis

Neste caso tem-se que a função de onda só é diferente de zero dentro da caixa, como a partícula é livre a equação de Schrodinger independente do tempo é dada por:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0, \text{ com } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (143)$$

cuja solução é:

$$\varphi = A\cos kx + B\sin kx \quad (144)$$

As condições de contorno são: $\varphi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$. Aplicando essas condições em 144 têm-se as seguintes soluções:

$$\begin{aligned} \varphi_n &= A \cos \frac{n\pi x}{a} \quad \text{para } n = 1, 3, 5, \dots \\ \varphi_n &= B \sin \frac{n\pi x}{a} \quad \text{para } n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (145)$$

Deste modo os níveis de energia são dados por:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (146)$$

4.3 Partícula confinada por um poço de potencial retangular limitado à direita por uma barreira impenetrável.

Seja o sistema quântico esquematizado na figura 3.4, onde tem-se: $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -V, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}$

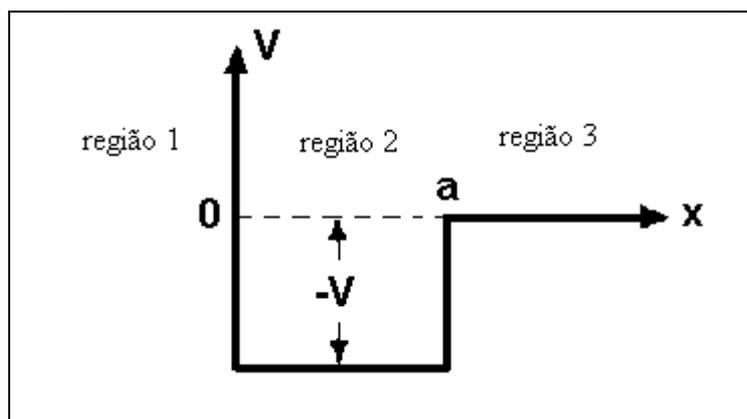


Figura 3.4: Poço de potencial retangular limitado à direita por uma barreira impenetrável.

Na região 1 $\varphi_1 = 0$, pois trata-se de uma barreira impenetrável.

Na região 2, para o caso em que $-V < E = -|E|$, tem-se a seguinte equação de Schroedinger independente do tempo:

$$\frac{d^2\varphi_2}{dx^2} + k_2^2\varphi_2 = 0, \text{ com } k_2^2 = \frac{2m(V - |E|)}{\hbar^2} \quad (147)$$

cuja solução é dada por:

$$\varphi_2 = Ae^{ik_2x} + Be^{-ik_2x} \quad (148)$$

Na região 3, também para o caso em que $-V < E = -|E|$, tem-se a seguinte equação:

$$\frac{d^2\varphi_3}{dx^2} + k_3^2\varphi_3 = 0, \text{ com } k_3^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \quad (149)$$

cuja solução é dada por:

$$\varphi_3 = Ce^{k_3x} + De^{-k_3x} \quad (150)$$

Mas quando $x \rightarrow \infty$, $Ce^{k_3x} \rightarrow \infty$, o que não é fisicamente aceitável portanto a solução reduz-se a:

$$\varphi_3 = De^{-k_3x} \quad (151)$$

Aplicando as condições de contorno tem-se:

- para $x=0$, tem-se que $A=-B$
- para $x=a$, como as funções de onda e as derivadas de primeira ordem devem ser contínuas tem-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} 2iA \operatorname{sen} k_2 a = D e^{-k_3 a} \\ 2A i k_2 \cos k_2 a = -k_3 D e^{-k_3 a} \end{cases} \quad (152)$$

Dividindo uma equação pela outra em 152, tem-se:

$$\tan k_2 a = -\frac{k_2}{k_3} \quad (153)$$

Substituindo os valores de k_2 e k_3 em 153 tem-se:

$$\tan \left[\frac{\sqrt{2m(V-|E|)}}{\hbar} a \right] = -\sqrt{\frac{(V-|E|)}{|E|}} \quad (154)$$

Mostrando que os autovalores de energia são as raízes da equação 154.

5.0 Conclusão

Neste estudo foi possível compreender a necessidade da elaboração da teoria da mecânica quântica, bem como compreender os seus princípios básicos por meio de analogias ótico-mecânicas.

A notação de Dirac mostrou-se muito útil na representação dos vetores de estado na mecânica quântica.

A resolução de alguns problemas propostos possibilitou uma aplicação direta da teoria o que proporcionou a fixação dos tópicos estudados.

6.0 Bibliografia

- 1) Nussenzveig, M.H., **Curso de Física Básica- ótica, relatividade e física quântica**, 1ª edição, Edgard Blucher, São Paulo, 1998.
- 2) Feymann, R.P., **Física em seis Lições**, 2ª edição, Ediouro, Rio de Janeiro, 1999.
- 3) Pohl, H.A., **Introdução à mecânica quântica**, Edgard Blucher, 1973.
- 4) Lopes, J.L., **A estrutura quântica da matéria**, 2ª edição, UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.
- 5) Born, M., **Atômica Physics**, 7ª edição, Hatner Publishing Company, New York, 1962.
- 6) Eisberg, R., Resnick, R., **Física Quântica- átomos , moléculas, sólidos, núcleos e partículas**, Elsevier, Rio de Janeiro, 1979.
- 7) Polkinghorne, J.C., **O mundo dos Quanta**, Fórum da Ciência, 1984.



Índice

1.0	Introdução.....	2
2.0	Fundamentos teóricos.....	3
2.1	Bandas de energia.....	3
2.2	Semicondutores.....	3
2.3	A massa efetiva.....	4
2.4	Poços e fios quânticos.....	5
2.4.1	Modelo utilizado para a solução do poço quântico.....	5
2.4.2	Modelo utilizado para a solução do fio quântico.....	7
3.0	Resultados.....	8
3.1	Poço quântico.....	8
3.2	Fio quântico.....	12
4.0	Conclusões.....	13
5.0	Referências bibliográficas.....	14

1.0 Introdução

Poços e fios quânticos são estruturas construídas a partir de materiais semicondutores, capazes de confinar elétrons em espaços nanométricos.

As nanoestruturas semicondutoras de PbTe, em particular, têm sido muito estudadas devido às suas aplicações em detectores e emissores no infravermelho e também em dispositivos termoelétricos^[1], e são fabricadas no Lab. de Materiais LAS do INPE.

Neste trabalho, foram determinados os auto-estados e as auto energias de elétrons confinados em poços e fios quânticos de semicondutores da família do PbTe^[2]. Para tanto, foi resolvida a equação de Schroedinger, e obtida assim a estrutura de subbandas de energias e suas relações de dispersão, e também as funções de onda correspondentes. Foi utilizada a aproximação da massa efetiva e, apenas para o fio quântico, a de barreira infinita. Resultados recentes da literatura foram reproduzidos.

2.0 Fundamentos teóricos

Nesta seção serão apresentados alguns conceitos e definições, bem como o modelo utilizado para a solução do poço e fio quântico.

2.1 Bandas de Energia

Nos materiais isolantes e semicondutores os elétrons estão presos nas ligações covalentes entre os átomos. É por esse motivo que esses materiais apresentam baixíssima condutividade elétrica.

Quando átomos de um elemento estão próximos, os níveis discretos de energia desses átomos sofrem acoplamentos resultando em bandas de energia de estados permitidos.

Uma banda pode ser separada da outra por uma faixa de energia proibida. A altura dessa banda proibida varia de acordo com o elemento químico que constitui o sólido.

As bandas de energia correspondem às soluções da equação de Schroedinger para diferentes distâncias entre os átomos.

2.2 Semicondutores

Semicondutores são substâncias cuja condutividade elétrica aumenta com a temperatura. No zero absoluto (zero Kelvin) esses materiais comportam-se como isolantes, ou seja, possuem a banda de valência totalmente preenchida.

A banda de valência é uma banda de energia formada por níveis de energia ocupados por elétrons mais fracamente ligados. É nesta banda de energia que se acumulam os buracos (partículas com carga positiva oposta a do elétron), e também que se dá o transporte de elétrons sob a influência do campo elétrico aplicado.

Nos semicondutores a condutividade elétrica aumenta com a temperatura de forma exponencial. Quanto maior a temperatura, mais os níveis superiores de energia estarão ocupados e mais níveis inferiores desocupados.

A condutividade dos semicondutores é causada pela excitação de elétrons da banda de valência para a banda de condução, a qual apresenta energias maiores que a banda de valência.

A quantidade de energia necessária para tirar um elétron da banda de valência e colocá-lo na banda de condução é que determina se um sólido será condutor, semicondutor ou isolante. Essa quantidade de energia varia conforme a altura da banda proibida de energia, também chamada de energia de *gap*.

Quanto menor a energia de *gap*, mais fácil é a transição do elétron da banda de valência para a banda de condução. Os metais possuem uma energia de *gap* muito pequena, enquanto que os semicondutores têm uma energia de *gap* maior (até 3eV)^[3]. Por este motivo, a condução nesses materiais fica condicionada à energia de excitação dos elétrons, ou seja, quanto maior a temperatura maior será a energia térmica dos elétrons e com isso mais elétrons são transportados para a banda de condução, aumentando assim a condutividade do material^[6].

Os semicondutores podem ser:

- Intrínsecos: são substâncias puras, sem qualquer tipo de impureza, e que, a zero Kelvin têm uma banda proibida de altura menor que 3eV. Nessa temperatura comportam-se como isolantes, pode-se citar como exemplo o Silício e o Germânio^[3,4].
- Extrínsecos: são semicondutores nos quais são adicionados substâncias chamadas impurezas, com o objetivo de aumentar a condutividade do material. A presença de impurezas afeta os níveis de energia e fornece novos portadores de corrente^[3,4].

2.3 A massa efetiva

Num cristal, o movimento de um elétron com momento fixo, pode ser descrito por ondas planas. Levando em consideração o princípio de incerteza de Heisenberg, o fato de fixar o momento e por conseguinte o vetor de onda, resulta em uma incerteza infinita na posição do elétron. Se por outro lado for fixada a posição do elétron, o vetor de onda torna-se incerto^[5].

Deste modo o movimento desse elétron pode ser descrito por um modelo semiclássico.

A localização pode ser descrita expressando o estado de um elétron como um pacote de onda. Levando em consideração a relação E x k (Energia versus vetor de onda) e considerando k unidimensional, o movimento de translação de um pacote de onda pode ser descrito pela velocidade de grupo da seguinte forma:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad (2.1)$$

Classicamente a variação da energia é igual ao trabalho realizado pela força do campo elétrico aplicado ao elétron, como segue:

$$dE = -e\xi v_g dt \quad (2.2)$$

onde

e é a carga do elétron

ξ é o campo elétrico aplicado

Substituindo (2.1) em (2.2) temos:

$$dE = \frac{-e\xi}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} dt \quad (2.3)$$

Assim teremos:

$$\frac{dk}{dt} = \frac{-e\xi}{\hbar} \quad (2.4)$$

Mas,

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt} \quad (2.5)$$

Substituindo (2.4) em (2.5), temos:

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{-e\xi}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (2.6)$$

Comparando com a equação clássica:

$$m \frac{dv_g}{dt} = -e\xi \quad (2.7)$$

Temos a chamada massa efetiva:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (2.8)$$

Deste modo vemos que a massa efetiva do elétron depende do vetor de onda. Neste caso utilizamos somente uma dimensão, mas k é um vetor tridimensional (k_x, k_y, k_z). Nessas condições a massa efetiva será escrita como um tensor, o qual pode ter valores diferentes de componentes^[3,5].

2.4 Poços e fios quânticos

Por meio do uso de semicondutores diferentes é possível criar corredores onde é possível prender os elétrons. Isto é feito por meio de heterojunções de semicondutores. Uma fina camada de um material é prensada entre duas camadas de um semicondutor com energia de *gap* maior. Deste modo tem-se uma restrição de movimento em relação ao plano do semicondutor situado entre as duas camadas de *gap* maior. As propriedades dos elétrons devido à restrição do movimento e também devido à largura das camadas dos materiais podem ser bastante diferentes do semicondutor original. A estrutura obtida é chamada de poço quântico.

Os fios quânticos são formados da mesma maneira que os poços, no entanto o confinamento dos elétrons é feito em uma direção.

2.4.1 Modelo utilizado para solução do poço quântico

Dado um poço de potencial mostrado na figura 1:

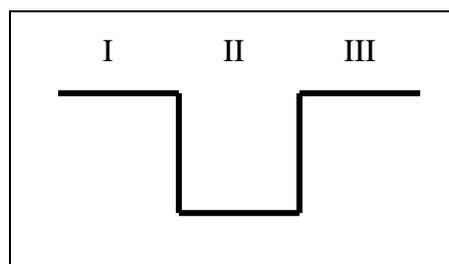


Figura 1: poço de potencial

Utilizando a aproximação da massa efetiva, o movimento dos elétrons em um poço quântico é descrito pela equação:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{el}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{el}^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.9)$$

onde:

m_{el}^* é a massa efetiva longitudinal do elétron

m_{et}^* é a massa efetiva transversal do elétron

A função de onda pode ser escrita como:

$$\psi_{k_x, k_y, n}(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} u_n(z) \quad (2.10)$$

Substituindo (2.10) em (2.9) obtemos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{et}^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] u_n(z) = \varepsilon_n u_n(z) \quad (2.11)$$

com

$$\varepsilon_n \equiv E_n - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{et}^*} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{et}^*} \quad (2.12)$$

A equação (2.11) mostra que o movimento do elétron é livre no plano xy. Ao longo da direção z, o movimento do elétron é confinado em um poço de potencial unidimensional, portanto o movimento em z é quantizado com auto-energias denotadas por ε_n .

Fazendo uma aproximação para um poço de potencial de barreira infinita, a solução geral da equação (2.11) é:

$$u_n(z) = A e^{ik_z z} + B e^{-ik_z z} \quad (2.13)$$

$$\text{com } k_z = \frac{\sqrt{2m_{et}^* \varepsilon}}{\hbar} \quad (2.14)$$

Utilizando as condições de contorno $u = 0$ em $z = 0$ e $z = l$ (l é a largura do poço), e também a condição de normalização, obtemos:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m_{et}^*} \left(\frac{n\pi}{l} \right)^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.15)$$

$$u_n(z) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi z}{l}\right) \quad (2.16)$$

Deste modo temos que a solução para o problema é dada por:

$$\begin{cases} \psi_{k_x, k_y, n}(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} u_n(z) \\ E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{et}^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{et}^*} \end{cases} \quad (2.17)$$

No caso de um poço de potencial finito V_0 , com potencial $V(x)$ definido como:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq a/2 \\ 0 & \text{para } -a/2 \leq x \leq a/2 \end{cases} \quad (2.18)$$

Nas regiões I e III, a solução geral de (2.11) para uma energia $\varepsilon < V_0$ é:

$$u(z) = A' e^{k_1 z} + B' e^{-k_1 z} \quad (2.19)$$

com

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_{et}^* (V_0 - \varepsilon)}}{\hbar} \quad (2.20)$$

Aplicando as condições da função de onda no infinito para que tenhamos soluções fisicamente aceitáveis e considerando que a onda incide da direita para a esquerda, temos que:

$$\begin{aligned} u_I &= A' e^{k_1 z} \\ u_{III} &= B' e^{-k_1 z} \end{aligned} \quad (2.21)$$

A solução na região II é determinada pelas equações (2.13) e (2.14).

Usando a condição de que a corrente de probabilidade deve ser contínua nas extremidades do poço e, portanto as funções de onda e suas primeiras derivadas devem ser contínuas em $z=0$ e $z=l$, são obtidas as seguintes equações transcendentais:

$$\tan \sqrt{\frac{m_{el}^* \varepsilon l^2}{2\hbar^2}} = \sqrt{\frac{V_0}{\varepsilon} - 1} \quad (2.22)$$

$$\cot g \sqrt{\frac{m_{el}^* \varepsilon l^2}{2\hbar^2}} = -\sqrt{\frac{V_0}{\varepsilon} - 1} \quad (2.23)$$

onde l e V_0 são, respectivamente a largura e altura do poço.

Com a escolha da origem no meio do poço, o potencial é uma função par, ou seja, $V(-x) = V(x)$ portanto temos soluções pares dadas por (2.22) e ímpares dadas por (2.23). As raízes dessas equações fornecerão as auto-energias do sistema.

A energia de transição do sistema é dada pela soma das energias do buraco e do elétron mais a energia do *gap*, ou seja:

$$E_t = \varepsilon_h + \varepsilon_e + E_g \quad (2.24)$$

onde:

ε_h é a energia do buraco

ε_e é a energia do elétron

E_g é a energia do *gap*

2.4.2 Modelo utilizado para solução do fio quântico

Utilizando a aproximação da massa efetiva, o movimento dos elétrons em um fio quântico é descrito pela equação:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2me_i^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2me_i^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (2.25)$$

Aqui o fio quântico está ao longo do eixo z , portanto o elétron é livre ao longo de z . Ao longo de x e y o movimento do elétron é quantizado com auto-energias designadas por ε_m e ε_n .

A função de onda pode ser escrita como:

$$\psi_{m,n,k_z}(x, y, z) = e^{ik_z z} u_{m,n}(x, y) \quad (2.26)$$

Substituindo (2.26) em (2.25) temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2me_i^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] u_{m,n}(x, y) = \varepsilon_{m,n} u_{m,n}(x, y) \quad (2.27)$$



com

$$\varepsilon_{m,n} \equiv E_{m,n} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} \quad (2.28)$$

onde $\varepsilon_{m,n} = \varepsilon_m + \varepsilon_n$ e $E_{m,n} = E_m + E_n$

Fazendo uma aproximação de poço infinito na direção x e y, o potencial é separável, portanto pode ser escrito como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_1(x) + V_2(y) \right] u_{m,n}(x, y) = \varepsilon_{m,n} u(x, y) \quad (2.29)$$

onde $V(x, y) = V_1(x) + V_2(y)$

Deste modo, a equação (2.29) pode ser resolvida por separação de variáveis. Portanto as subbandas com estados ligados nas direções x e y, e livre na direção z são descritas por:

$$\begin{cases} \psi_{m,n,k_z}(x, y, z) = e^{ik_z z} u_{m,n}(x, y) \\ E_{m,n} = \varepsilon_{m,n} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e^*} \end{cases} \quad (2.30)$$

com

$$u_m = \sqrt{\frac{2}{l_x}} \sin\left(\frac{m\pi x}{l_x}\right) \text{ e } u_n = \sqrt{\frac{2}{l_y}} \sin\left(\frac{n\pi y}{l_y}\right) \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.31)$$

$$\varepsilon_m = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{m\pi}{l_x}\right)^2 \text{ e } \varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{n\pi}{l_y}\right)^2 \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.32)$$

3.0 Resultados

Os resultados apresentados dizem respeito ao PbTe, portanto foram utilizados os dados da tabela 1.

Símbolo	Descrição	Valores
m_{et}^*	massa efetiva do elétron transversal	0.024
m_{el}^*	massa efetiva do elétron longitudinal	0.240
m_{ht}^*	massa efetiva do buraco transversal	0.022
m_{hl}^*	massa efetiva do buraco longitudinal	0.310
E_g (meV)	energia de gap	190

Tabela1: Dados utilizados nos cálculos do poço quântico de PbTe.

3.1 Poço quântico

Na figura 1 é mostrado o gráfico da relação de dispersão. Nota-se que a relação para cada n fornece um ramo de parábola, a qual é chamada subbanda de energia.

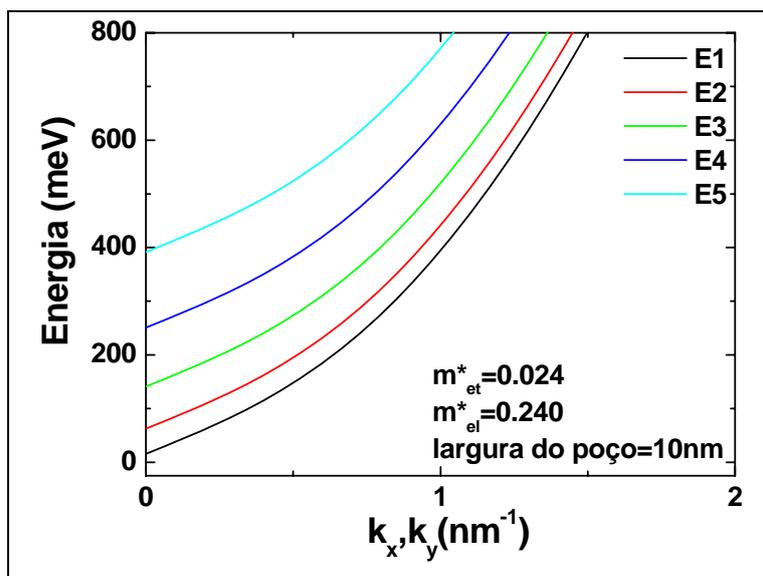


Figura 1: Relação de dispersão para poço infinito

Quando $k=0$ $E_n=\varepsilon_n$, portanto temos $E_1=15.5$, $E_2=62.6$, $E_3=140.9$, $E_4=251.5$, $E_5=392.5$.

Na figura 2 é apresentado o gráfico do comportamento da energia em relação à variação da largura do poço infinito.

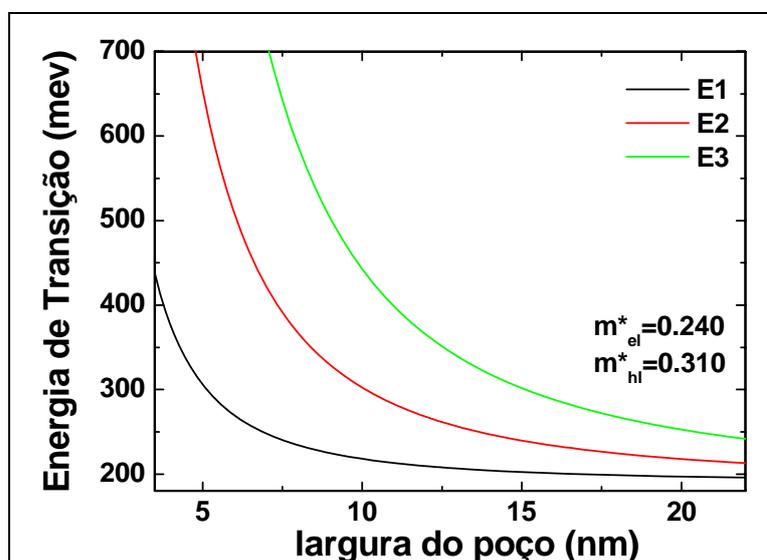


Figura 2: Comportamento da energia devido à variação da largura do poço infinito.

Pode-se notar que conforme a largura do poço aumenta há uma diminuição da energia, deste modo pode-se afirmar que quanto maior o confinamento do elétron, maior é a energia do sistema.

Na figura 3 é apresentado o gráfico das funções de onda. Nota-se que as funções de onda anulam-se nas extremidades do poço.

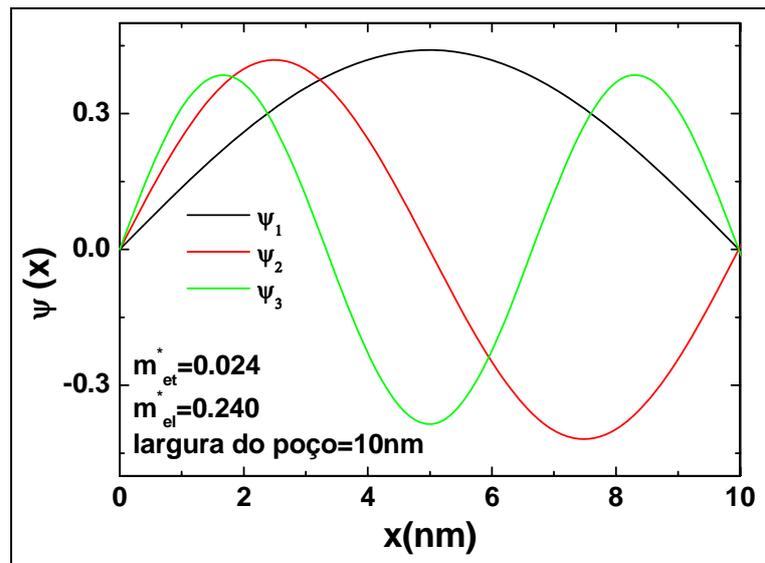


Figura 3: Funções de onda para poço de potencial infinito

Na figura 4 são apresentadas as auto-energias para um poço finito. Para este cálculo foi considerado um potencial de 500meV, referente ao PbEuTe, e uma largura de 10nm.

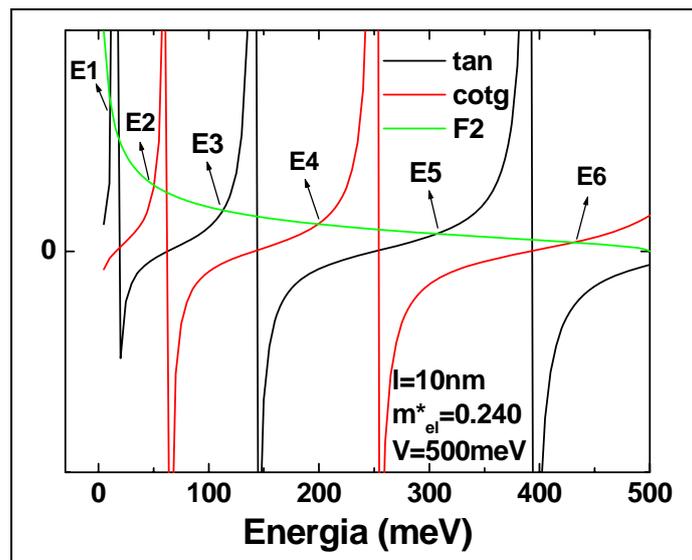


Figura 4: Auto-energias para um poço de potencial finito.

Foram encontrados seis níveis de energia com os seguintes valores em meV: E1= 10.9; E2= 50.4; E3=113.1; E4=199.3; E5=307.0, E6=431.0.

Comparando o gráfico da relação de dispersão do poço infinito (figura 1) com o gráfico das auto-energias do poço de potencial finito (figura 4), pode-se notar que na relação de dispersão, quando o vetor de onda é nulo, os primeiros níveis de energia para o poço de potencial infinito têm valores próximos aos das auto-energias encontradas no poço de potencial infinito.

Na figura 5 é mostrado o gráfico do comportamento da energia devido à variação da largura do poço de potencial finito.

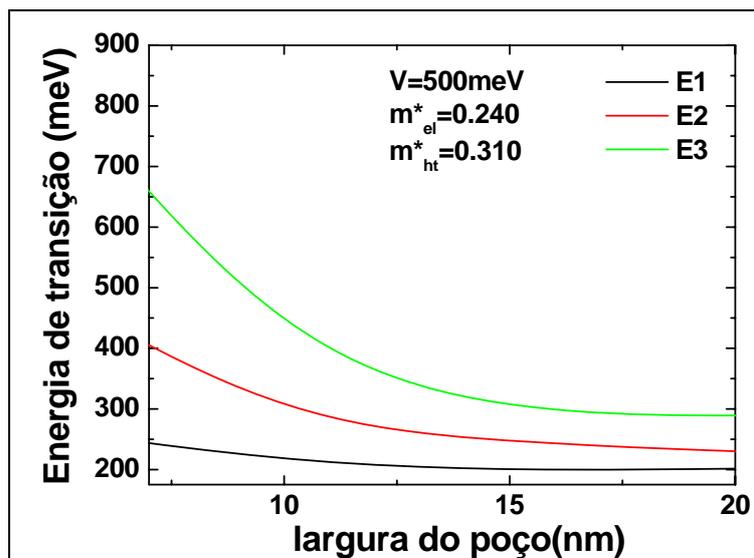


Figura 5: Comportamento da energia devido à variação da largura do poço de potencial finito

Assim como no resultado para o poço infinito (figura 2), para o poço finito a energia diminui à medida que a largura do poço aumenta, ou seja, quanto maior o confinamento, maior a energia do sistema.

Na figura 6 é mostrado o gráfico do comportamento da energia devido à variação do potencial.

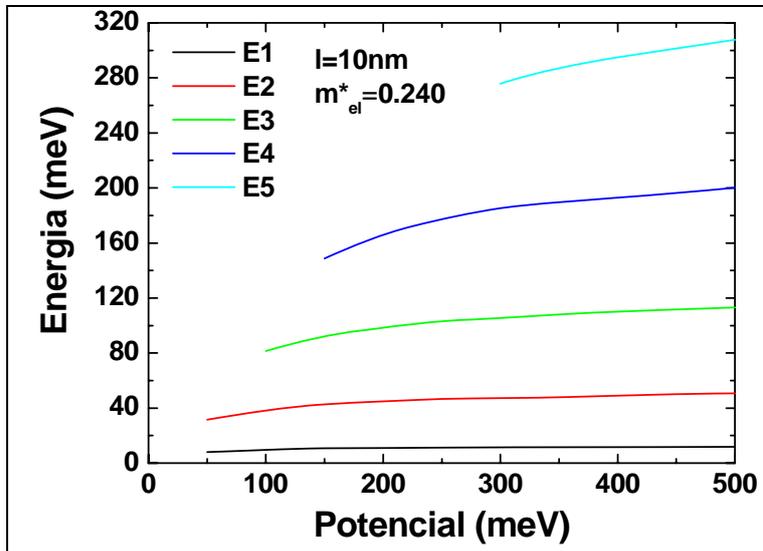


Figura 6: Comportamento da energia devido à variação do potencial.

Nota-se que a energia do sistema, para a curva de E1, praticamente não varia conforme o aumento do potencial do poço finito. Para os níveis mais elevados, pode-se observar que a diferença entre os níveis de energia aumenta conforme o potencial aumenta. Entretanto para os três primeiros níveis a variação é bem pequena, indicando que o modelo de poço infinito pode ser uma boa aproximação para a determinação dos primeiros níveis de energia de poços de potenciais finitos.

3.2 Fio quântico

Na figura 7 é mostrado o gráfico da relação de dispersão para fio quântico infinito de PbTe.

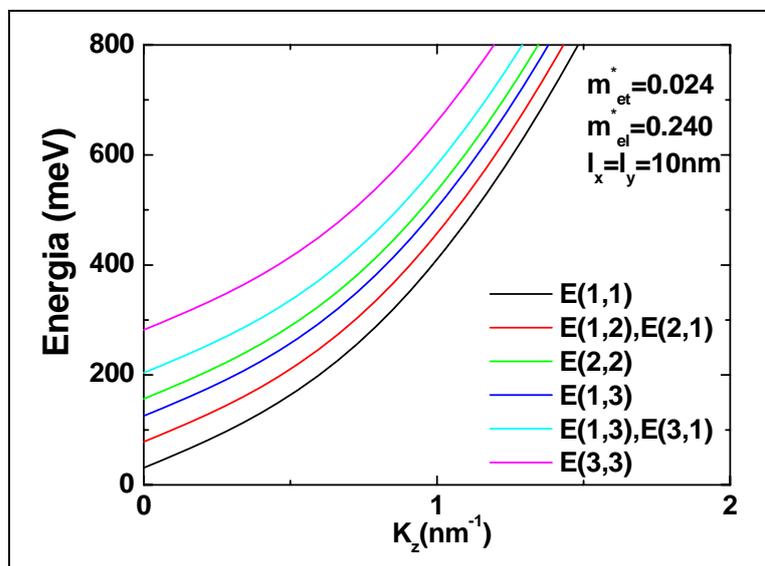


Figura 7: Relação de dispersão para fio infinito

As combinações dos números quânticos (m,n) , da equação 2.30, resultam em estados com a mesma energia, ou seja degenerados. Pelo gráfico pode-se notar a existência de três níveis de energia degenerados.

Na figura 8 é mostrado o gráfico do comportamento da energia conforme a variação de l_x, l_y . Neste gráfico foi considerado um fio quântico quadrado, ou seja, $l_x = l_y$.

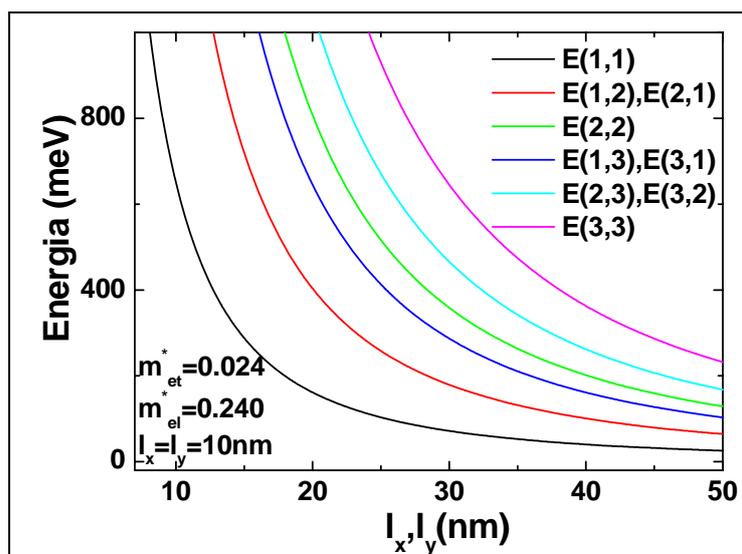


Figura 8: Comportamento da energia conforme a variação de l_x, l_y .

Pelo gráfico, pode-se verificar que quanto menores as dimensões da seção do fio, maior é a energia obtida.

4.0 Conclusões

O poço quântico infinito pode ser usado como aproximação para a determinação dos primeiros níveis de energia em poços quânticos finitos.

Tanto para fio como para o poço, quanto maior o confinamento do elétron, maior é a energia do sistema.

No poço finito, quanto maior o potencial maior será a diferença entre os níveis de energia.

Este trabalho permitiu fixar conceitos de mecânica quântica e dominar técnicas de solução de problemas de nanoestruturas, demonstrado por meio da reprodução de resultados de publicações científicas recentes.

5.0 Referências bibliográficas

- [1] Lin, Y.M, Dresselhaus, M.S. **Thermoelectric properties of superlattice nanowires**, physical Review B 68, 075304 (2003).
- [2] E.A. de Andrada e Silv., **Optical transition energies for lead-salt semiconductor quantum wells**. Physical Review B 60, 8859 (1999).
- [3] Swart, J.W. **Materiais elétricos: Fundamentos e semicondutores**. Campinas: UNICAMP, 2004. 400p.
- [4] Nussenzveig, M.H., **Curso de Física Básica- ótica, relatividade e física quântica**, 1ª edição, São Paulo: Edgard Blucher, 1998. 437p.
- [5] H. Ibach, H. Luth. **Solid – State Physics – An Introduction to Principles of Materials Science**. 2ª edição. Berlin: Springer-Verlag. 1996.
- [6] Davies, J.H. **The physics of low-dimensional semiconductors – An Introduction**. New York: Cambridge University Press, 1998. 438p.