

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS

INSTITUTO DE FÍSICA

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM SISTEMAS COM MASSA
DEPENDENTE DA POSIÇÃO

CÉSAR LEONARDO MOREIRA FERRAZ

CÉSAR LEONARDO MOREIRA FERRAZ

Propriedades de Transporte em Sistemas com Massa Dependente da
Posição

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo de Paula Almeida Lima.

Maceió

2016

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale – CRB4 - 661

- F381p Ferraz, Cesar Leonardo Moreira.
Propriedades de transporte em sistemas com massa dependente da posição
/ Cesar Leonardo Moreira Ferraz. – 2018.
79 f. : il.
- Orientador: Rodrigo de Paula Almeida Lima.
Dissertação (mestrado em Física da Matéria Condensada) – Universidade
Federal de Alagoas. Instituto de Física, Maceió, 2016.
- Bibliografia: f. 75-82.
1. Probabilidade de transmissão. 2. Modelo Hamiltoniano cinético. 3. Massa
4. Física quântica – Simulação (computadores). I. Título.

CDU: 538.9



Universidade Federal de Alagoas

Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-970 Maceió - AL. Brasil
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

***“Propriedades de transporte em sistemas com massa dependente
da posição”***

por

Cesar Leonardo Moreira Ferraz

A Banca Examinadora composta pelos professores Rodrigo de Paula Almeida Lima (Orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva, da Universidade Federal de Alagoas – Campus Arapiraca, e Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato **aprovado com grau “B”**.

Maceió, 11 de julho de 2016

Prof. Dr. Rodrigo de Paula Almeida Lima

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidélis de Moura

Prof. Dr. Askery Alexandre Canabarro Barbosa da Silva

À MINHA FAMÍLIA
POR ESTAR SEMPRE AO MEU LADO

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a minha mãe, Marilene, a quem nunca conseguirei retribuir o esforço, carinho, incentivo, amor e preocupação. À meu avô Viola (in memoriam) e minha Vó Detinha por me motivarem a sempre continuar com meus sonhos, serei sempre grato. À meus avós, Ilda e Natinho, que apesar da distância e das circunstâncias, torcem por mim. À minha tia Ilva, por todo carinho dedicado, desde sempre. Aos meus irmãos André, Bruna e Luís, pelo imenso apoio e amor incondicional e pelos infinitos momentos de felicidade e pelo conforto que sempre me dão. À toda família, incluindo tios, primos, por acreditarem em mim. Todos vocês foram de fundamental importância para que este trabalho se concretizasse.

Ao professor Rodrigo Lima por ser um excelente orientador e amigo, pela paciência nos momentos difíceis, pelas discussões e trocas de ideias excepcionais e por tudo o que me ensinou.

Aos meus amigos do Instituto de Física, Cristiano, Givanildo, João Paulo, Samuel e Nazareno por compartilharem comigo bons momentos, conhecimentos e acima de tudo suas amizades, sem esquecer do nosso futebol.

Ao meu amigo Alexandro Nascimento, por toda ajuda e sugestões que foram fundamentais para o desenvolvimento desta dissertação.

À Luana, pelo apoio, carinho e por fazer parte desta caminhada árdua junto comigo.

A todos meus amigos.

Ao departamento de Física da UFAL, professores, funcionários com quem conversei, discuti e aprendi.

À CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Muitos materiais semicondutores têm sido responsáveis por inúmeros avanços tanto no desenvolvimento de novas tecnologias quanto na compreensão de novos fenômenos físicos. Um destes fenômenos é o efeito túnel, que é a probabilidade de um elétron transpor um estado de energia classicamente proibido, esse fenômeno de tunelamento é puramente quântico sem análogo clássico. Assim, em diferentes sistemas físicos é natural o aparecimento de uma massa efetiva dependendo da posição, como por exemplo em heterojunções, poços quânticos e super-redes. A expressão para o Hamiltoniano cinético deve ser mudado nesses casos. Neste trabalho, resolvemos dois modelos de Hamiltoniano com termos de massa efetiva dependente da posição devido a uma estrutura periódica, estudamos a estrutura de banda e investigamos a probabilidade de transmissão e reflexão para uma partícula quântica em uma heteroestrutura formada por dois tipos de materiais, onde em cada um deles os portadores de carga tem uma massa efetiva diferente, calculamos também sua probabilidade de transmissão usando o novo modelo proposto por [1] para um potencial constante. Os resultados encontrados são comparados com os existentes na literatura.

Palavras-chave: Probabilidade de Transmissão. Massa dependente da posição. Hamiltoniano cinético.

ABSTRACT

Many semiconductor materials have been responsible for many advances both in the development of new technologies and the understanding of new physical phenomena. One of these phenomena is the tunneling effect, which is the probability of an electron transposing a classically prohibited energy state, this tunneling phenomenon is purely quantum without classical analogue. Thus, in different physical systems, the appearance of an effective mass depending on the position, for example in heterojunctions, quantum wells and superlattices, is natural. The kinetic Hamiltonian must be changed in these cases. In this work, we solve two Hamiltonian models with terms of effective position dependent mass due to a periodic structure, we study the band structure and investigate the probability of transmission and reflection for a quantum particle in a heterostructure formed by two types of materials, where in each of them the load carriers have a different effective mass, we also calculate their probability of transmission using the new model proposed by [1] for a constant potential. The results are compared with those found in the literature.

Keywords: Transmission probability. Mass dependent position. Kinetic Hamiltonian.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	5
2	FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	9
2.1	Introdução	9
2.2	Equação de Schrödinger	10
2.3	Ortogonalidade dos auto estados	12
2.4	Equação da continuidade	13
2.5	Operadores hermitianos	15
2.6	Poço quadrado infinito	16
2.7	Tunelamento Quântico	19
3	TEORIA DOS METAIS, ISOLANTES E SEMICONDUTORES	25
3.1	Introdução	25
3.2	Discussão sobre Metais, Isolantes e Semicondutores	26
3.3	O Modelo Quântico do Gás de Elétrons	29
3.4	Modelo de Condução de Bloch	36
3.5	Os Semicondutores	38
3.6	Equação de Schrödinger com Massa Efetiva	41
4	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM MASSA EFETIVA VARIÁVEL	43
4.1	Introdução	43

SUMÁRIO	2
4.2 Hamiltonianos Com Massa Dependente da Posição	44
4.3 Heterostrutura com Massa dependente da posição	48
4.3.1 Análise Gráfica	55
4.4 Modelo Alternativo para o Hamiltoniano	56
4.4.1 O Hamiltoniano	57
4.4.2 Condições de Contorno	57
4.4.3 Bandas de Energia	59
4.4.4 Breve Discussão	60
4.5 Cálculo da Transmissão	61
4.5.1 Análise Gráfica	63
4.6 Transmissão no Novo Modelo	65
4.6.1 Transmissão na Estrutura com Potencial Do Novo Modelo	67
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS	72
A Espaço de Hilbert	75
Referências	77

Lista de Figuras

2.1	Esquema do poço quadrado unidimensional infinito.	16
2.2	Uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira de potencial. A figura pode mostra os dois casos possíveis: $E < V_0$ (energia menor que a altura da barreira) e $E > V_0$ (energia maior que a altura da barreira).	19
2.3	Coefficiente de transmissão em função da energia através da barreira com diferentes comprimentos.	23
2.4	Coefficiente de transmissão em função da energia através de um comprimento dado por $L = 100 \times \text{Å}$ para diferentes alturas de barreira.	23
3.1	Ocupação das bandas em isolantes (a) e em condutores (b). As regiões tracejadas representam as faixas de energia ocupadas pelos elétrons.	28
3.2	Capacidade Térmica valor experimental do Potássio.	35
3.3	Bandas de valência e de condução em semicondutores. As regiões hachuradas representam a ocupação dos elétrons em $T > 0$. A distância entre as bandas é o gap de energia E_g	39
3.4	Gráfico de E versus k , relação de dispersão do elétron no vácuo e no composto GaAs com massa efetiva.	42
4.1	Heteroestrutura periódica com dois tipos de materiais, m_1 e m_2 . Em uma aproximação envolvendo massa efetiva, tratamos uma partícula quântica “livre” com saltos periódicos de massa.	50

4.2	Interface no ponto x_0 entre dois materiais com diferentes massas, m_1 e m_2	51
4.3	Gráfico da relação de dispersão com gaps de energia, energia dada em eV	56
4.4	Gráfico da relação de dispersão eq.(4.56), que mostra a dependência do termo $\cos[k(a+$ $b)]$ e a energia.	59
4.5	Gráfico das duas relações de dispersões.	60
4.6	Gráfico da Heteroestrutura para o cálculo da transmissão.	61
4.7	Gráfico do coeficiente de transmissão da equação (4.67) em função da energia.	64
4.8	Gráfico da transmissão para o modelo proposto por Lima	66
4.9	Gráfico das transmissões sobrepostos.	67
4.10	Barreira a potencial constante	68
4.11	Gráfico da transmissão para potenciais diferentes e com o mesmo comprimento de barreira $b = 0,5 \times \mu \text{ m}$	69
4.12	Gráfico da transmissão para valores de comprimento de barreira diferentes, para um mesmo potencial.	70

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A Física da Matéria Condensada (FMC) procura investigar os estados da matéria em que os átomos constituintes estão suficientemente próximos e interagem simultaneamente com muitos vizinhos, dando uma explicação detalhada de propriedades e fenômenos a partir de conceitos e equações fundamentais da Mecânica Quântica (MQ) e da Física Estatística (FE). Em seu estado condensado, que são consideradas mais comuns, podemos destacar os líquidos e os sólidos amorfos. Ao longo de décadas com grandes avanços das técnicas experimentais de pesquisa e, simultaneamente, com o desenvolvimento da MQ, a principal ferramenta teórica utilizada em FMC, foi possível investigar diversas propriedades da matéria tais como: elétricas, magnéticas, óticas, mecânicas e térmicas. A FMC é o ramo de estudo da Física que tem maior contribuição com as inovações tecnológicas, por exemplo, a descoberta do transistor em 1947 que aprimorou estudos no campo da eletrônica e atualmente grandes avanços em estruturas do grafeno, as investigações das propriedades óticas da matéria levaram à descoberta do laser, diodos emissores de luz, cristais líquidos, possibilitando uma inovação no campo das telecomunicações e ópticas, entre outros.

Dentro da MQ é importante destacar um fenômeno de grande interesse, o Tunelamento Quântico, um conceito central da MQ desenvolvido inicialmente a partir de estudos de radioatividade, é uma manifestação do caráter ondulatório da matéria, não tendo por isso análogos clássicos. O conceito

quântico de tunelamento foi primeiro resolvido e aplicado por Gamov, em 1928, para explicar o decaimento- α de núcleos pesados. Na área da Física do Estado Sólido, introduzido inicialmente por Fowler e Nordheim [2] explicaram um modelo de tunelamento através de uma barreira unidimensional, aplicando um campo elétrico externo intenso, e posteriormente por Zener [3] para estudar o movimento de elétrons através de bandas de energia proibidas. Com o grande avanço no desenvolvimento da teoria do tunelamento, aplicável também em vários outros sistemas físicos, foi possível a criação de dispositivos quânticos que contribuíram para o grande avanço tecnológico das últimas décadas. Um exemplo importante é o diodo túnel. Em 1958 Leo Esaki [4] incorporou o efeito de tunelamento a esse dispositivo, o que lhe rendeu o prêmio Nobel de Física de 1973.

No desenvolvimento da massa efetiva em 1937, Wannier [5] publicou um artigo onde é estudado o espectro de energia para uma configuração eletrônica de um elétron excitado em um cristal ideal, onde esse elétron excitado é retirado da banda de mínima energia, formando assim um buraco, complementando o estudo do artigo citado em [6] e [7], obtiveram grande sucesso nas formações de níveis de energia da mínima banda devido principalmente a impurezas em cristais em redes periódicas.

Em 1955 Luttinger e Kohn [8], desenvolveram um novo método para a equação da massa efetiva para elétrons movendo-se em uma estrutura periódica perturbada. Este método é muito bem adaptado para estados de impurezas encontrados em [5] e para caso onde a banda é degenerada, onde a equação normal de Wannier deve ser substituída por um conjunto de equações diferenciais acopladas. Nas referências [9] e [10] é complementado um forte avanço na teoria de massa efetiva. O uso dessa ferramenta em descrever a equação de Schrödinger (ES) com massa efetiva já vem evoluindo ao longo desses anos para explicar propriedades eletrônicas de portadores de carga em metais e semicondutores, além de vários outros problemas com dependência na massa. Logo, esse modelo é bastante útil para descrever elétrons e buracos em metais e semicondutores. Em metais, os portadores de carga são descritos como partículas livres e a informação de suas interações com material estão contidos na massa.

Sabemos que a ES descreve uma partícula de massa constante, e esta tem sido bastante útil para

explicar diversos problemas na MQ, como a solução exata do átomo de hidrogênio, o oscilador harmônico, etc. Mas ao longo de vários anos, alguns sistemas físicos demonstraram problemas e inconsistências com a ES com massa constante, devido a esses problemas levaram a escrever a ES com uma dependência da massa efetiva com a posição. Problemas com massa dependendo da posição já eram conhecidos pelos físicos teóricos e são de longa data. Em vários sistemas físicos é natural o aparecimento de uma massa efetiva dependendo da posição, como em estudos de pontos quânticos [11], líquidos quânticos [12], heterojunções [13], [14], e super-redes [15], [16].

Com o aperfeiçoamento do efeito de tunelamento, foi possível desenvolver junções perfeitas entre dois materiais semicondutores diferentes, conhecido como heterojunções, possibilitando a construção de uma grande variedade de estruturas com baixa dimensionalidade, tais como, super-redes, poços quânticos, dupla barreira. Com grande potencial de aplicação tecnológica, as heteroestruturas possuem inúmeras propriedades e fenômenos observados em baixas e altas temperaturas, um desses fenômenos é o tunelamento ressonante em dupla barreira.

Investigado teoricamente por Esaki e Tsu [17], o tunelamento ressonante de elétrons em dupla barreira, e as primeiras observações de efeitos na heteroestruturas foram medidas de correntes de tunelamento ressonante numa estrutura simétrica de GaAlAs/GaAs/GaAlAs realizado experimentalmente por Esaki, Tsu e Chang [18], e a ressonância ocorre quando a energia de Fermi (E_F) na região do emissor esteja alinhado com um nível ressonante dentro do poço quântico.

Dentro desse contexto, o presente trabalho estudará dois sistemas físicos com massa dependente da posição, o primeiro usando um Hamiltoniano cinético onde existe uma dependência de parâmetros [19], já o outro modelo proposto por Lima [1] onde este modelo considera todas as permutações possíveis entre os operadores, tornando o hamiltoniano um operador hermitiano. Utilizando ondas planas nestes modelos em uma heteroestrutura periódica formada por dois materiais diferentes será calculado os coeficientes de Transmissão e Reflexão para as mesmas condições de contorno do problema com potencial zero, e posteriormente usando barreira de potencial com $V_0 > 0$ constante, os quais serão comparados com resultados existentes na literatura.

Atualmente o tema tem sido bastante estudado e tem ganhado grande importância em diversos

campos da Física, como no espalhamento em heteroestruturas, estudo de semicondutores, pontos e anéis quânticos [20, 21], cálculo de funções de Green [22], problemas analíticos [23], supersimetria [24], osciladores e estados coerentes [25], uma revisão de ambiguidade nos operadores de energia cinética e hermiticidade [26, 27], na busca de soluções exatas da equação de Schrödinger [28] entre outros.

Este trabalho tem como objetivo introduzir o leitor à ideia de sistemas de massa dependente da posição na MQ, além de estudar as propriedades eletrônicas de dois sistemas físicos da matéria condensada, todos no estado sólido, usando modelos contínuos. No modelo contínuo a estrutura da rede desaparece e os portadores de carga são descritos como partículas livres. O modelo contínuo tradicional da FMC é a teoria de massa efetiva. Outro fenômeno que iremos tratar é o efeito túnel, cuja ocorrência é uma manifestação do comportamento ondulatório da matéria, não tendo, por isso, análogos clássicos.

A Dissertação está organizada da seguinte forma, no próximo capítulo encontra-se uma breve revisão de MQ, e como aplicação da teoria fizemos dois exemplos clássicos em MQ, uma é o poço quadrado infinito e o outro do tunelamento através de barreira de potencial. No capítulo 3 feita uma breve revisão da teoria de massa efetiva em metais, isolantes e semicondutores. No capítulo 4, será discutido os modelos já propostos para operadores de energia cinética com massa efetiva dependendo da posição. Serão comparados dois modelos em uma heteroestrutura periódica, os minigaps e minibandas de energia para dois sistemas, e por fim será apresentado o problema que se pretende solucionar, usando as mesmas condições de contorno, agora usando uma barreira de potencial será calculado a reflexão e transmissão e os resultados comparados. Por fim, no capítulo 5 serão apresentadas as considerações finais e perspectivas para este trabalho.

Capítulo 2

FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

2.1 Introdução

Para iniciar o estudo da Mecânica Quântica, partiremos de um breve desenvolvimento histórico - corpos que absorvem toda a radiação que incide em sua superfície são denominados corpos negros. Quando se aquece um objeto, o mesmo começa a emitir ondas eletromagnéticas num vasto espectro de frequências. Deste modo, há um equilíbrio entre energia absorvida e a emitida. O espectro de emissão de um corpo negro é característico, e depende apenas da temperatura. Segundo a Física Clássica um corpo negro pode irradiar ondas em qualquer frequência, portanto tendo energia infinita, problema conhecido como catástrofe do ultravioleta. Para resolver esse problema Max Planck em 1900 pensando nesse problema da física clássica publicou um artigo intitulado como “Sobre a teoria da lei de distribuição de energia do espectro normal” [29] que deu início a uma das maiores revoluções da história da física naquele ano, a solução do problema da radiação do corpo negro, a radiação é absorvida ou emitida por um corpo aquecido não sob a forma de ondas, mas por meio de pequenos pacotes de energia. Anos depois, a explicação do efeito fotoelétrico [30]

realizado por Albert Einstein em 1905 considerado como "*annus mirabilis*" que, segundo Einstein, baseado nas ideias proposta por Planck, a luz e as demais ondas eletromagnéticas são formadas de pequenos pacotes de energia (quanta) chamados de fótons, pela explicação desse fenômeno foi o ganhador do prêmio Nobel do ano de 1921. Em 1924 L. de Broglie, ganhador do prêmio Nobel de 1929, sugeriu que toda partícula possui um comprimento de onda associado ao seu momento essas ideias de L. de Broglie, Davisson e Germer, em 1927 demonstram a natureza ondulatória do elétron [31]. Os conceitos da MQ começaram a ganhar força por volta da década de 20 do século passado, com o reconhecimento da comunidade científica sobre as primeiras teorias da estrutura do átomo e as suas partículas elementares (elétron, próton e nêutron). Com o desenvolvimento da MQ novas abordagens teóricas foram propostas, como o princípio da exclusão de Pauli e a estatística de Fermi-Dirac.

Percebeu-se que a Física Clássica estava se tornando limitada por não mais responderem tais perguntas e interpretar com precisão os fenômenos. A MQ que é um dos pilares da física moderna, e está muito bem consolidada nos dias de hoje, consegue descrever o comportamento de objetos muito pequenos, com dimensões próximas às dos átomos.

2.2 Equação de Schrödinger

A MQ é considerada como uma das teorias fundamentais para descrever a evolução temporal e compreender o comportamento ondulatório das partículas. Apesar de ser diferente das equações clássicas, ela contém a mecânica clássica como um caso limite, e, ao mesmo tempo, necessita desse caso limite para estabelecer a sua linguagem.

Em 1925 o físico austríaco Erwin Schrödinger propôs um novo formalismo para a teoria quântica como consequência do seu estudo da tese de De Broglie de 1924, a qual foi construída com base no modelo atômico de Bohr incorporando as ideias quânticas de Planck. O objetivo era encontrar uma equação diferencial de onda cuja solução é a função de onda. Tal equação, escrita para uma

dimenso da seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \psi(x, t) + V(x, t) \quad (2.1)$$

É uma equação diferencial linear de segunda ordem, contendo uma derivada temporal de primeira ordem e uma espacial de segunda ordem. No caso de uma partícula livre o potencial $V(x, t) = V$ deve ser uma constante independente da posição da partícula pois, nesse caso, deve-se esperar que a descrição quântica do movimento da partícula seja compatível com aproximação clássica. A função de onda $\psi(x, t)$ é uma função contínua e, sempre que o potencial $V(x, t)$ for finito, com derivada também contínua.

Para campos conservativos, a equação de Schrödinger com o potencial, independente do tempo para o caso unidimensional, pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) \quad (2.2)$$

A mecânica de sistemas quânticos unidimensionais pode ser representada por uma função de onda $\psi(x, t)$, que satisfaz a equação (2.2) para os potenciais $V(x)$. Pode ser resolvida pelo uso do método de separação de variáveis da seguinte forma

$$\psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t) \quad (2.3)$$

No qual se escreve a solução como o produto de funções que dependem de variáveis distintas, de forma que obteremos duas expressões,

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = E \quad (2.4)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x). \quad (2.5)$$

A separação de variáveis transformou uma equação diferencial parcial em duas equações diferenciais ordinárias. Resolvendo a equação (2.4) e suprimindo a constante,

$$\varphi(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (2.6)$$

A equação (2.5) é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo ela descreve as funções de onda de estados estacionários das partículas quando sua energia esta bem definida, dependendo das condições impostas à função de onda $\psi(x, t)$. Com esta equação podemos obter a maioria dos resultados da mecânica quântica não relativística a exemplo o espectro de energia do átomo de hidrogênio. As soluções, $\psi(x, t)_n$, associadas ao seu correspondente autovalor E_n (para estados não degenerados), são chamadas de autofunções de energia.

Nesta dissertação iremos trabalhar só com a equação de Schrödinger independente do tempo

2.3 Ortogonalidade dos auto estados

As soluções estacionárias da equação de Schrödinger apresentam uma propriedade muito importante, a ortogonalidade

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0 \quad (m \neq n). \quad (2.7)$$

Como as autofunções $\psi_m(x)$ e $\psi_n(x)$ satisfazem a equação de Schrödinger independente do tempo, Eq.(2.5),

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_m(x) + V(x) \psi_m(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_m(x) \quad (2.8)$$

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + V(x) \psi_n(x) = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n(x). \quad (2.9)$$

Multiplicando a Eq.(2.8) por $\psi_n(x)^*$ e a Eq.(2.9) por $\psi_m(x)^*$, e subtraindo esses resultados, obte-

mos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left(\psi_n^* \frac{d}{dx} \psi_m - \psi_m \frac{d}{dx} \psi_n^* \right) = (E_m - E_n) \psi_n^* \psi_m. \quad (2.10)$$

Integrando a equação acima, tem-se

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n^*(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m(E_m - E_n)} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{d}{dx} \left(\psi_n^*(x) \frac{d}{dx} \psi_m(x) - \psi_m(x) \frac{d}{dx} \psi_n^*(x) \right) dx. \quad (2.11)$$

A integral do lado esquerdo se anula, porque as autofunções se anulam a medida que os limites de integração são arbitrariamente grandes. Assim se, $\psi_m(x)$ e $\psi_n(x)$ são autofunções que pertencem a autovalores distintos de energia, $E_m - E_n \neq 0$, então obedecem a relação de ortogonalidade mostrada em (2.7). Portanto podemos escrever,

$$\int_{+\infty}^{-\infty} \psi_m(x) \psi_n^*(x) dx = \delta_{mn}, \quad (2.12)$$

em que δ_{mn} é conhecido como delta de Kronecker e é definido da seguinte forma

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{se } m \neq n \\ 1, & \text{se } m = n. \end{cases} \quad (2.13)$$

Podemos dizer então, que as autofunções distintas pertencentes ao espaço de soluções (espaço de Hilbert) são ortogonais.

2.4 Equação da continuidade

A função de onda ψ associada a uma partícula é complexa, pois Schrödinger esperava que a função de onda $\psi(x, t)$ fosse uma grandeza física observável, isto é, tivesse algum significado físico com características de grandezas mensuráveis. Segundo a interpretação probabilística de Max Born, a probabilidade dP de uma partícula associada a uma função de onda Ψ ser encontrada,

em um dado instante t , no interior de um elemento de volume d^3r em torno do ponto (x, y, z) é igual a $|\Psi|^2 d^3r$, isto é,

$$|\Psi|^2 d^3r = dP. \quad (2.14)$$

e o módulo quadrado da função de onda

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t)\psi(x, t) \quad (2.15)$$

A presença do fator imaginário na equação de Schrödinger é suficiente para descartar a função de onda $\psi(x, t)$ como uma quantidade física observável. A equação (2.15) é uma quantidade real e, portanto, tem características de grandeza física mensurável, nos dá uma interpretação probabilística da função de onda. Na Mecânica Newtoniana para podermos descrever um sistema clássico de partículas completamente e até mesmo prever todas as grandezas associadas ao movimento, faz-se necessário apenas conhecer a posição e a velocidade de todas as partículas. Para verificar o que ocorre quando o movimento de uma partícula quântica é levado em conta, deriva-se $|\Psi|^2$ em relação ao tempo

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[\Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi^* - \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi \right] \quad (2.17)$$

de

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* = \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (2.18)$$

tem-se

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.19)$$

Considera-se $J = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ e $\rho \equiv |\Psi|^2$ de modo que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0. \quad (2.20)$$

Percebemos que ρ e J , da equação acima, obedece a uma equação análoga à equação da continui-

dade conhecida na mecânica dos fluidos e também no eletromagnetismo, onde mostra a conservação da massa do fluido e da carga, respectivamente. Em MQ essa expressão é conhecida como conservação de probabilidade.

2.5 Operadores hermitianos

Os operadores hermitianos são definidos tal que se $f(r)$ e $g(r)$ pertencem ao espaço de Hilbert¹, então o operador \hat{O} será hermitiano se, e somente se

$$\langle \hat{O} \rangle = \int f^* \hat{O} g dr = \int (\hat{O} f)^* g dr = \left[\int f^* (\hat{O} g) dr \right]^* = \langle \hat{O} \rangle^*, \quad (2.21)$$

onde \hat{O} é o operador que está relacionado ao observável O .

A Eq.(2.21) determina o valor médio de O (representa-se o operador por uma função operador $O(r, P)$), que deve ser real. De maneira geral, considerando U e W dois conjuntos de funções e definindo o mapeamento $\hat{O}: U \rightarrow W$ com $\hat{O}(u) = w(u \in U : w \in W)$. Simbolicamente se pode escrever esta relação como um produto do operador \hat{O} com a função u

$$\hat{O}(u) = \hat{O}u = w. \quad (2.22)$$

Um operador com a propriedade

$$\hat{O}(\alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2) = \alpha_1 \hat{O} \mu_1 + \alpha_2 \hat{O} \mu_2 \quad (2.23)$$

onde μ_1, μ_2 são funções arbitrária e α_1, α_2 são constantes arbitrárias, é chamado operador linear.

É importante ressaltar que a classe de operadores hermitianos são lineares e podem ser aplicados tanto no primeiro membro de um produto interno quanto no segundo, apresentando sempre o mesmo resultado. Em Mecânica Quântica estes operadores surgem naturalmente, pois seus valores

¹Detalhes no Apêndice A.

esperados são reais.

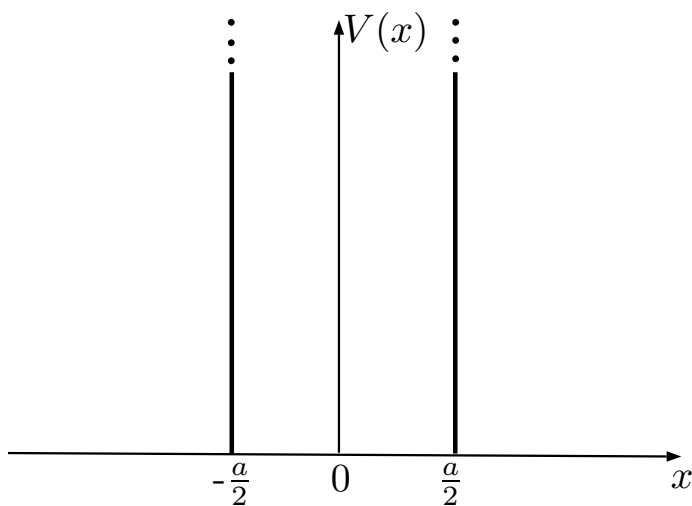
2.6 Poço quadrado infinito

Considera-se uma partícula movendo-se livremente ao longo do eixo x , exceto pelo fato que nas posições $x = -a/2$ e $x = a/2$, existem paredes impenetráveis, isto é, a probabilidade da partícula ser encontrada fora do intervalo é estritamente nula. Deste modo, a função de onda $\psi(x)$, fora do poço é igual a zero. Matematicamente, define-se então o potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ \infty, & \text{em outros casos} \end{cases}. \quad (2.24)$$

A Fig.(2.1) representa esquematicamente o poço quadrado infinito para o caso unidimensional

Figura 2.1. Esquema do poço quadrado unidimensional infinito.



Fonte: Autor, 2016.

As soluções do poço quadrado infinito unidimensional são confinadas no interior do mesmo, pois seria necessária uma energia infinita para romper a barreira de potencial. Utilizaremos so-

mente a equação de Schrödinger independente do tempo na região $-a/2 \leq x \leq a/2$, ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi. \quad (2.25)$$

Na região onde a partícula encontra-se confinada o potencial é nulo, assim

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x). \quad (2.26)$$

Definindo $k^2 = 2mE/\hbar^2$ pode-se verificar que a solução para a equação acima é dada da seguinte forma

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (2.27)$$

em que A e B são constantes arbitrárias.

A função de onda deve se anular nas extremidades do poço, isto é, $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$. As soluções possíveis para este problema serão $\sin(ka/2) = 0$ para $A \neq 0$ ou $\cos(ka/2) = 0$ para $B \neq 0$. As constantes A e B não podem ser simultaneamente nulas, pois isto levaria $\psi(x) = 0$ para todo valor de x . No primeiro caso as soluções serão da forma $\psi(x) = A \sin(kx)$, onde $A \neq 0$, $B = 0$ e $\sin(ka/2) = 0$, que resulta

$$ka/2 = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (2.28)$$

Entretando, se descartamos $k = 0$, pois $\psi(x) = 0$ (para todo valor de x), as soluções distintas são

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{onde } n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.29)$$

Onde os valores possíveis de energia E são dados por

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (2.30)$$

ou ainda,

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{com } n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.31)$$

Para encontrar o valor da constante A , normaliza-se $\psi(x)$

$$\int |\psi|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \sin^2(kx) dx = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (2.32)$$

Portanto dentro do poço as soluções são

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (2.33)$$

Repetindo os mesmos cálculos para a condição $\psi(x) = B \cos(kx)$, onde $B \neq 0$, $A = 0$ e $\cos(ka/2) = 0$, normalizando e resolvendo a integral iremos obter a seguinte expressão,

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (2.34)$$

Observamos que os valores de $k_n = \frac{n\pi}{a}$ são quantizados, pois o número inteiro n é um exemplo de número quântico, portanto, as funções de onda que satisfazem o problema são aquelas para as quais se tem um número inteiro ou semi-inteiro de comprimentos de onda de L. de Broglie dentro do intervalo $[-a/2, a/2]$. Em Mecânica Clássica uma partícula pode se mover dentro do poço com qualquer valor de energia, porém, em MQ a energia está quantizada tendo apenas valores possíveis da forma

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{onde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.35)$$

Percebemos que os níveis de energia do poço infinito mostram que o espectro de energias permitidas consiste em um número infinito de níveis discretos. Temos também que as energias dos estados aumentam com o quadrado do valor dado a n . Como existe apenas uma função de onda para cada autovalor de energia, esses níveis de energia são chamados não-degenerados. Já para uma dada função de onda, havendo mais de um autovalor de energia, esses níveis se chamam degenerados.

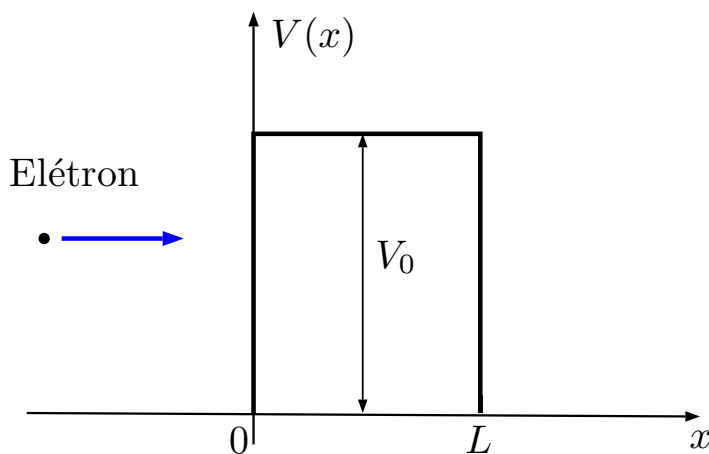
2.7 Tunelamento Quântico

Considere um elétron sendo acelerado e incidindo sobre uma barreira de potencial de altura V_0 , mesmo tendo uma energia E , menor do que a altura da barreira, esse elétron tem uma probabilidade finita de atravessar e ser projetado do outro lado dessa barreira. Este fenômeno é conhecido como Tunelamento Quântico ou apenas Tunelamento. Em MQ, a Transmissão e a Reflexão de partículas em barreiras de potencial são muito importantes, sendo responsáveis por diversos fenômenos interessantes e aplicações práticas.

Trataremos o caso de uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira, de acordo a Fig.(2.2) que possui a seguinte energia potencial $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ V_0 & 0 < x < L \\ 0, & \text{se } x > L \end{cases} \quad (2.36)$$

Figura 2.2. Uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira de potencial. A figura pode mostra os dois casos possíveis: $E < V_0$ (energia menor que a altura da barreira) e $E > V_0$ (energia maior que a altura da barreira).



Fonte: Autor, 2016.

Em que V_0 é positivo e define a altura da barreira e a distância L define a largura. Mesmo tratando de um modelo simples é possível extrair todos os comportamentos físicos mais relevantes, e que são comuns a todas as barreiras de potencial existentes na natureza.

A solução da equação de Schrödinger para as regiões $x < 0$ e $x > L$ é dada da seguinte forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{Kx} + De^{-Kx}, & 0 < x < L \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}, & x > L \end{cases} \quad (2.37)$$

em que A, B, C, D, E e F são constantes, em geral complexas, e o vetor de onda é $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Iremos considerar que a partícula incide sobre a barreira de potencial pelo lado esquerdo, nesse caso, do lado direito, não teremos uma onda se propagando para esquerda fazendo com que $F = 0$ na equação (2.37). O coeficiente A representa a amplitude da onda de probabilidade incidente, B a da refletida e E a da transmitida, todas com o mesmo valor do vetor de onda k e o mesmo valor do comprimento de onda de L. de Broglie.

A densidade de corrente de probabilidade j será constante, e terá como valor

$$j = v_g(|A|^2 - |B|^2) = v_g|E|^2 \quad (2.38)$$

em que $v_g = \hbar k/m$ é a velocidade da partícula, ou velocidade de grupo. Podemos então definir os coeficientes de reflexão R e de transmissão T como

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|E|^2}{|A|^2} \quad (2.39)$$

em que foi utilizado o fato de v_g ser o mesmo em ambos os lados da barreira. Até agora fizemos o tratamento tanto para o caso $E < V_0$ e $E > V_0$. Por isso agora mostraremos as soluções interna a região da barreira $0 < x < L$. Para tanto, será necessário considerar separadamente os casos $E < V_0$ e $E > V_0$.

Sabemos que a função de onda deve ser contínua e sua derivada nos pontos $x = 0$ e $x = L$, iremos encontrar as seguintes relações para $x = 0$

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik(A - B) &= K(C - D) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Já para $x=L$, teremos

$$\begin{aligned} Ee^{ikL} &= Ce^{KL} + De^{-KL} \\ ikEe^{ikl} &= K(Ce^{KL} - De^{-KL}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

podemos eliminar C e D das equações (2.40) e (2.41) e calcular as relações B/A e E/A . Após algumas simplificações obteremos o seguinte resultado para o coeficientes de reflexão e transmissão para o caso $E < V_0$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(KL)} \right]^{-1} \quad (2.42)$$

e

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(KL)}{4k^2 K^2} \right]^{-1} \quad (2.43)$$

Uma verificação importante é que estes coeficientes devem obedecer a conservação de partículas, de modo que cada partícula incidente deve ser ou refletida ou transmitida tal que deve obedecer a relação

$$R + T = 1 \quad (2.44)$$

Quando temos $KL \gg 1$ o coeficiente de transmissão nessas condições apresenta um decaimento exponencial com a largura da barreira $T \approx \frac{16k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2} e^{-2KL}$

Para o caso em que $E > V_0$, teremo $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Repetindo as mesmas condições de continuidade da função de onda e da sua derivada nos pontos $x = 0$ e $x = L$, determinamos as constantes A, B, C, D, E e F . Fazendo todas as simplificações os coeficientes de reflexão e

transmissão é dado como

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k^2k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'L)} \right]^{-1} \quad (2.45)$$

e

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'L)}{4k^2k'^2} \right]^{-1} \quad (2.46)$$

A eq.(2.46) mostra que o coeficiente de transmissão T é em geral menor do que 1, mas podemos notar que $T = 1$ ocorre quando $k'L = n\pi$, em que n é um número inteiro positivo, esse é um fenômeno conhecido como ressonância que implica que as energias de estados ressoantes é dado da seguinte forma

$$E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} + V_0 \quad (2.47)$$

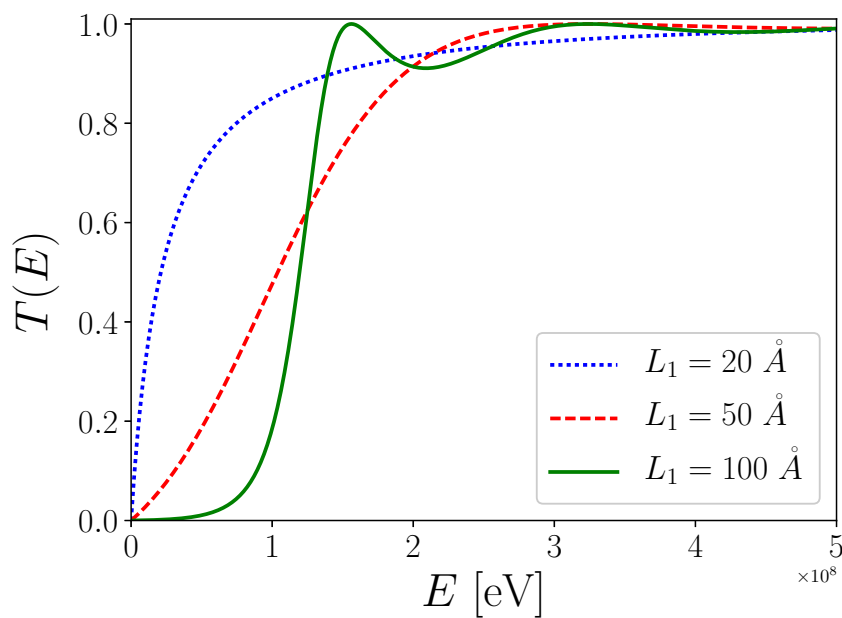
Em comparação com a Mecânica Clássica para o caso em que $E < V_0$ teremos $T = 0$, ou seja, a partícula é totalmente refletida. Para o caso em que temos $E > V_0$ a energia maior que o potencial da barreira a partícula é totalmente transmitida $T = 1$.

A dependência quadrática implica em termos ressonâncias quando $T = 1$ e ocorre em certos intervalos de energia que pode ser visto pelas figuras (2.3) e (2.4). A Fig. (2.3) mostra o coeficiente de transmissão em função da energia para certos comprimentos da barreira, fixamos o potencial em $100 \times 10^4 \text{ eV}$, e a Fig. (2.4) mostra o coeficiente de transmissão para o mesmo tamanho de barreira $100 \times \text{Å}$ e para valores diferentes de potenciais.

Como aplicação na área tecnológica temos o Microscópio Eletrônico de Varredura por Tunelamento (STM) [32], outro mecanismo conhecido e semelhante ao STM é o de Emissão de Elétron de Metais Frios, e outra situação importante é na emissão de partículas alfa pelos núcleos. Todos esses exemplos são baseados no efeito de tunelamento quântico

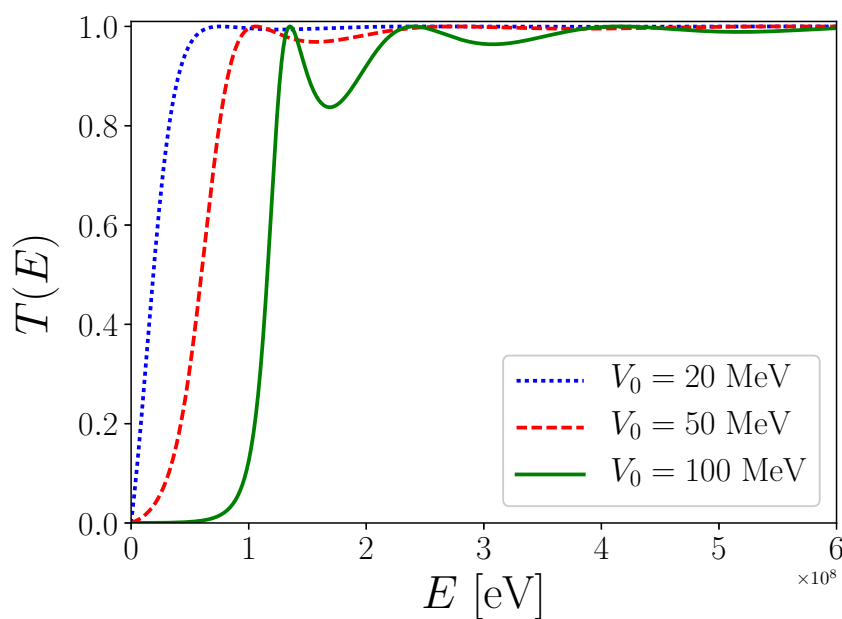
Toda discussão feita até aqui pode ser encontrado na literatura de forma mais ampla e completa, lembrando que foi só uma breve revisão da equação de Schrödinger com a massa constante, nos próximas seções será apresentado uma revisão sobre a condução de elétron em metais, isolantes e semicondutores e percebendo que a massa deixa de ser constante se tornando uma massa efetiva.

Figura 2.3. Coeficiente de transmissão em função da energia através da barreira com diferentes comprimentos.



Fonte: Autor, 2016.

Figura 2.4. Coeficiente de transmissão em função da energia através de um comprimento dado por $L = 100 \times \text{\AA}$ para diferentes alturas de barreira.



Fonte: Autor, 2016.

Para uma maior compreensão dos aspectos da mecânica quântica é sugerido à leitura dos seguintes livros textos adotado em muitos cursos de graduação e pós-graduação: Cohen [33] Sakurai [34] entre muitos outros.

Capítulo 3

TEORIA DOS METAIS, ISOLANTES E SEMICONDUTORES

Na seção anterior vimos uma breve revisão da MQ e da equação de Schrödinger com massa constante, e como aplicação dessas teorias fizemos dois exemplos clássicos, o poço quadrado infinito e o tunelamento. Antes de retornarmos ao estudo da equação de Schrödinger agora para a massa dependente da posição, nesta seção iremos apresentar o comportamento de elétrons em metais, isolantes e semicondutores e como surge a massa efetiva.

3.1 Introdução

Desde a descoberta do elétron por Joseph John Thomson, em 1897, originou um grande impacto de forma imediata nas teorias da época sobre a estrutura da matéria e propôs um novo mecanismo para o transporte de cargas nos metais. Logo quando se discute o comportamento de partículas que se movem dentro de estruturas que lhe impõem potenciais periódicos ao longo de seu movimento é conveniente introduzir o conceito de massa efetiva.

A teoria de massa efetiva é um modelo contínuo tradicional desenvolvido na física da matéria

condensada. Ela é bastante útil para a descrição de portadores de carga (elétrons e buracos), ou seja, em uma banda de condução o que interessa são os estados ocupados por elétrons, portadores de carga negativa. Na banda de valência é necessário determinar os estados desocupados, denominados de buracos, portadores de carga positiva, que em um cristal semicondutor irá contribuir para a corrente elétrica, um exemplo seria o gálio em cristal de silício. Apesar desse buraco ter massa real nula, ele irá responder a campos externos como se fosse uma partícula com massa real igual à sua massa efetiva. A massa efetiva vai depender das interações que os portadores de carga estão sujeitos na estrutura cristalina. Vamos discutir a teoria de massa efetiva para os metais, isolantes e semicondutores, onde ao longo da descrição do problema ficará evidente que tudo será compreendido completamente dentro do formalismo da MQ, começando desde a descrição por Paul Drude até os conceitos apresentados por Sommerfeld.

3.2 Discussão sobre Metais, Isolantes e Semicondutores

Na seção anterior estudamos brevemente como a MQ é estruturada para termos a massa constante, porém devido a alguns sistemas possuírem potenciais periódicos devemos introduzir o conceito de massa efetiva.

Os metais são um dos três grupos dos elementos distinguidos por suas propriedades de ionização e de ligação, a maioria dos metais é quimicamente estável, com a exceção notável dos metais alcalinos e alcalinos-terrosos. Caracterizados por possuírem uma boa condução elétrica e térmica, os metais tem uma estrutura cristalina, na qual os átomos estão arranjados de maneira ordenada em que os elétrons da camada de valência fluem livremente. A maioria dos metais são mecanicamente resistentes, dceis, maleáveis, entre outras características que distinguem os metais de outros materiais. Em um sólido as energias possíveis dos elétrons estão agrupadas em bandas permitidas separadas por bandas proibidas devido à periodicidade do potencial criado por íons em sólidos. A condutividade elétrica nos metais se dá pelos elétrons de condução, banda parcialmente preenchida,

e são eles também os responsáveis por grande parte do transporte térmico.

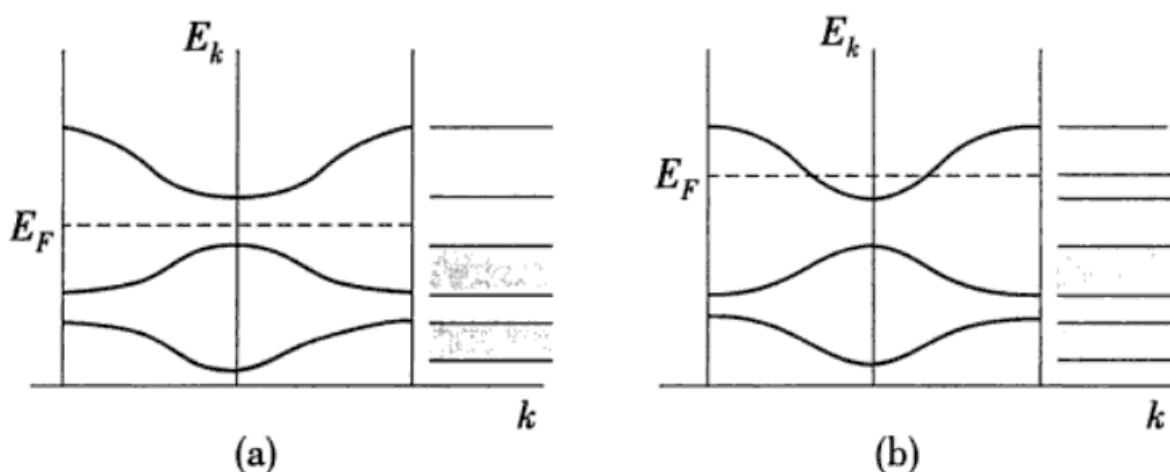
As bandas de energia mais profundas completamente ocupadas por elétrons são chamadas de bandas de valência, nesta banda os elétrons de valência se desprendem dos átomos e tem a mobilidade de percorrer todo o sólido e por essa razão, eles são chamados de elétrons de condução. As propriedades de condução do cristal dependem fundamentalmente do fato da última banda estar cheia ou não. Logo, a estrutura de rede de um sólido metálico será formada por íons positivos localizados que dão origem aos fônons devido a quantização dos modos vibracionais da rede, e elétrons de condução não localizados. Para simplificarmos o modelo, desprezaremos interações entre elétrons e fônons, de forma que teremos um sólido metálico fracamente interagente constituído de dois sistemas, um apenas com fônons e outro formado apenas por elétrons. Podemos estudar os fônons e os elétrons separadamente neste modelo. A capacidade térmica do sólido metálico, por exemplo, é calculada pela soma da capacidade térmica devida aos fônons com aquela devida aos elétrons.

Muitas das propriedades eletrônicas dos metais podem ser compreendidas em termos de um modelo de elétrons livres, nesse modelo os elétrons de condução se movem livremente no metal. Os elétrons de cada átomo em um sólido estão sujeitos à interação com os átomos vizinhos, isso se justifica pois colisões entre elétrons em um metal ocorrem com pouca frequência. Isso se deve ao princípio de exclusão de Pauli que não permite que ocupem o mesmo número quântico. Após uma colisão, o elétron deve ocupar orbitais que estejam desocupados. Portanto, iremos tratar um gás de elétrons livres sujeito ao princípio de exclusão de Pauli, sendo o nível mais alto chamado de energia de Fermi (E_f). Realizando medidas de condutividade elétrica à temperatura próxima de $0K$ (estado fundamental), observa-se que alguns materiais apresentam-se como bons condutores enquanto que, outros materiais como excelentes isolantes. Até as primeiras décadas do século 20, não havia uma explicação plausível para esta observação.

Os isolantes, isto é, materiais que não conduzem corrente elétrica, são cristais que têm a última banda completamente cheia. Nestes cristais, a aplicação de um campo elétrico externo não pode alterar o momentum total dos elétrons que é nulo, pois todos os estados disponíveis estão ocupados,

mas deve existir um estado totalmente desocupado. Logo, não há passagem de corrente elétrica quando o campo é aplicado. Então, a condição necessária para um cristal ser isolante é que ele têm a última banda completamente cheia. A Fig.(3.1) mostra uma possível distribuição das últimas bandas e sua ocupação por elétrons num metal e isolante.

Figura 3.1. Ocupação das bandas em isolantes (a) e em condutores (b). As regiões tracejadas representam as faixas de energia ocupadas pelos elétrons.



Fonte: Fonte: S.M. Rezende [35]

Para entendermos o significado físico da massa efetiva em metais, antes do problema quântico, será apresentado a descrição clássica dos metais. Logo após a descoberta do elétron por J.J. Thompson em Cambridge no ano de 1897, P. Drude considerou um metal como um gás de elétrons livres em uma caixa, sendo os íons positivos que formam a estrutura do material representados por esferas duras, impenetráveis e fixas. No modelo de Drude [36]-[37], os elétrons se movem entre os íons, e ocasionalmente se chocam com eles, choques entre os elétrons são desprezados. As colisões são consideradas elásticas e ocorrem de maneira aleatória. Drude resolveu o problema usando a ideia de tempo de relaxação. Embora seja considerado simples, o modelo de Drude obteve alguns pontos positivos ao explicar propriedades referentes aos aspectos elétricos e ópticos, como a dedução da lei de Ohm da condução elétrica, assim como apresentou alguns pontos negativos, como a dependência errada entre a condutividade elétrica e a temperatura. Ele postulou que o efeito das colisões entre os elétrons e os íons da rede podem ser levados em consideração através de um termo de relaxação in-

introduzido de maneira fenomenológica na equação de movimento do elétron. Onde a condutividade elétrica do metal é dado pela equação

$$\sigma(T) = \frac{n_e e^2 \tau(T)}{m_e} \quad (3.1)$$

Com esse modelo Drude foi capaz de relacionar a condutividade elétrica, uma grandeza macroscópica que pode ser medida experimentalmente, com as quantidades microscópicas, n_e , e , m_e , respectivamente, a densidade eletrônica, a carga e a massa do elétron, são constantes. A expressão para a condutividade de Drude contém o tempo de relaxação como único parâmetro desconhecido. Ela nos permite, portanto, a partir de medidas experimentais da condutividade, obter o tempo de relaxação, um importante parâmetro associado ao movimento microscópico eletrônico. O modelo de Drude satisfaz a lei de Ohm da condutividade elétrica.

Além desse modelo ter seus pontos fortes ele falha em alguns como, este modelo falha ao prevê a dependência entre a condutividade elétrica e a temperatura de forma errada, prevê de forma errada a contribuição dos elétrons para a capacidade calorífica, dada por $c = (3/2)n_e k_B$ e falha também ao não descrever a diferença que há entre condutor, semicondutor e isolante.

Essas falhas no modelo de Drude se apresentam devido à utilização da teoria clássica para descrever a condução dos elétrons nos metais, através da distribuição de Maxwell-Boltzmann. Efeitos quânticos foram incluídos no modelo de Drude em 1928 por Sommerfeld, que considerou as propriedades quânticas dos elétrons em um metal [38]. Ele tratou o problema, não como um gás ideal clássico, mas como um gás ideal quântico, ou seja, um gás de férmions, substituindo a distribuição de Maxwell-Boltzmann pela distribuição de Fermi-Dirac. Com isso explicando várias propriedades que o modelo de Drude não conseguia explicar.

3.3 O Modelo Quântico do Gás de Elétrons

Com o surgimento da teoria quântica, a condução eletrônica passa ser descrita com base na

mesma, e não mas pela descrição da teoria clássica. As principais alterações referentes ao modelo clássico têm origem nas propriedades estatísticas dos sistemas quânticos, especificamente a classe no qual o elétron se enquadra, os férmions, que são constituídos por spin semi-inteiro e satisfaz o princípio de exclusão de Pauli. O gás de elétrons livres é uma boa aproximação que permite deduzir várias das propriedades desses materiais. A expressão já traduz algumas aproximações básicas do modelo. Os elétrons não interagem entre si, a situação ideal para que consideremos cada elétron como uma partícula independente, ou seja, que se movimenta de maneira não-correlacionada com os demais. Além de serem "livres" porque não estão sob a ação de nenhum potencial externo. Em sólidos reais, um elétron interage fortemente tanto com a rede como com os demais elétrons. A interação elétron-elétron é mais difícil de ser aproximada. Ainda assim, surpreendentemente a aproximação mais simples, do elétron livre (independente) produz bons resultados. Para nossa discussão, consideraremos simplesmente como um gás de elétrons livres.

Com essas aproximações, consideraremos um gás de N elétrons em uma caixa de volume V . Para um sistema em 3 dimensões a equação de Schrödinger é dada como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3.2)$$

Para estudarmos as propriedades referentes ao transporte de carga e de energia, vamos utilizar as condições periódicas de contorno (Born-von Kármán) de uma caixa retangular de lados L_x , L_y e L_z e, conseqüentemente, volume $V = L_x L_y L_z$ na qual os elétrons estão confinados e que pode ser expressa por

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z + L_z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L_y, z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\psi(x + L_x, y, z) = \psi(x, y, z) \quad (3.4)$$

Diante destas condições de contorno, podemos utilizar soluções da equação Schrödinger (3.2)

na forma de ondas planas, que pode ser escrita como

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.5)$$

Com autoenergias iguais a

$$E(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m}, \quad \text{com} \quad \mathbf{K}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (3.6)$$

Um conjunto de vetores de onda no espaço discreto satisfaz as condições de contorno representada pela expressão (3.5), dessa forma, o espectro de energia é quantizada. Logo, apenas os vetores de onda \mathbf{K} e as suas componentes satisfazem as seguintes expressões

$$e^{ik_x L_x} = e^{ik_y L_y} = e^{ik_z L_z} = 1 \quad (3.7)$$

que implica

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z} \quad (3.8)$$

onde n_x , n_y e n_z representam valores inteiros. A equação (3.6) é chamada de relação de dispersão

Cada vetor de onda representa um ponto dentro de uma esfera no espaço \vec{k} . A energia na superfície dessa esfera é chamada de energia de Fermi e os vetores de onda na superfície de Fermi têm magnitude k_F tal que

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (3.9)$$

Para sabermos o número de estados N entre zero e a energia de Fermi E_F , precisamos calcular o número de vetores de onda tais que

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \leq E_F \quad (3.10)$$

e multiplicar por dois, pois cada vetor de onda corresponde a dois estados com spin opostos. Podemos observar que existe um vetor de onda permitido para elemento de volume $(2\pi/L)^3$ no espaço

\vec{k} . Logo o número total de elétrons no sistema será dado por duas vezes o número de elementos de volume dentro da esfera, portanto

$$N = 2 \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V f_F^3}{3\pi^2} \quad (3.11)$$

como $k_F^3 = \sqrt{2mE_F}/\hbar^2$, teremos a seguinte expressão

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2} \quad (3.12)$$

A partir do vetor de Fermi podemos definir outra quantidade útil, que é a velocidade de uma partícula com a energia de Fermi, então a velocidade de Fermi será dada por

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} = \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (3.13)$$

O número de estados por unidade de energia é chamado de densidade de estados e é dado por

$$D(E) \equiv \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (3.14)$$

A massa efetiva em um metal está relacionada com sua capacidade térmica. Vamos agora obter uma expressão para a capacidade térmica eletrônica válida para baixas temperaturas $k_B T \ll E_F$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Para isso vamos considerar o aumento na energia total $\Delta U \equiv U(T) - U(0)$ de um sistema de N elétrons quando ele é aquecido de 0 a T , que é

$$\Delta U = \int_0^\infty E D(E) f(E) dE - \int_0^{E_F} E D(E) dE, \quad (3.15)$$

onde $f(E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac

$$f(E, T, \mu) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}, \quad (3.16)$$

multiplicando a identidade

$$N = \int_0^{\infty} D(E)f(E)dE = \int_0^{E_F} D(E)dE , \quad (3.17)$$

por E_F , obteremos

$$\Delta U = \int_{E_F}^{\infty} (E - E_F)f(E)D(E)dE + \int_0^{E_F} (E_F - E)(1 - f(E))D(E)dE , \quad (3.18)$$

A primeira integral acima dá a energia necessária para levar um elétron com E_F para um estado com energia $E < E_F$ e a segunda integral dá a energia necessária para trazer um elétron de energias menores que E_F para E . As duas integrais contribuem positivamente para a energia.

A capacidade térmica de um gás de elétrons é obtida diferenciando ΔU em relação a T na última equação, portanto a capacidade térmica eletrônica será

$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_0^{\infty} (E - E_F) \frac{df}{dT} D(E) dE , \quad (3.19)$$

Em sistemas de baixas temperaturas uma boa aproximação é tomar a densidade de estados na energia de Fermi $D(E_F)$, portanto ela será constante e pode sair da integral acima. O Potencial químico μ na distribuição de Fermi-Dirac com a temperatura também pode ser ignorada podendo ser substituído pela energia de Fermi E_F . Logo para baixas temperaturas a capacidade térmica eletrônica pode ser dado como

$$C_{el} = \frac{1}{3} \pi^2 D(E_F) k_B^2 T , \quad (3.20)$$

e a densidade de estados no nível de Fermi é dada por

$$D(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3N}{2k_B T_F} , \quad (3.21)$$

onde T_F é a temperatura de Fermi dada como

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} , \quad (3.22)$$

Então podemos escrever a expressão final para a capacidade térmica da seguinte forma

$$C_{el} = \frac{1}{2}\pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} \quad (3.23)$$

A capacidade térmica no metal é dada pela soma da capacidade térmica dos elétrons com a dos fônons. Nesta breve discussão obtivemos apenas a capacidade térmica eletrônica, mas pode-se obter a parte dos fônons em livros de estado sólido seguindo os passos em [39]. A capacidade térmica será dada por

$$C = \gamma T + \alpha T^3 , \quad (3.24)$$

onde γ e α são coeficientes característicos do material e são dado por

$$\gamma = \frac{\pi^2 N k_B}{2T_F} \quad (3.25)$$

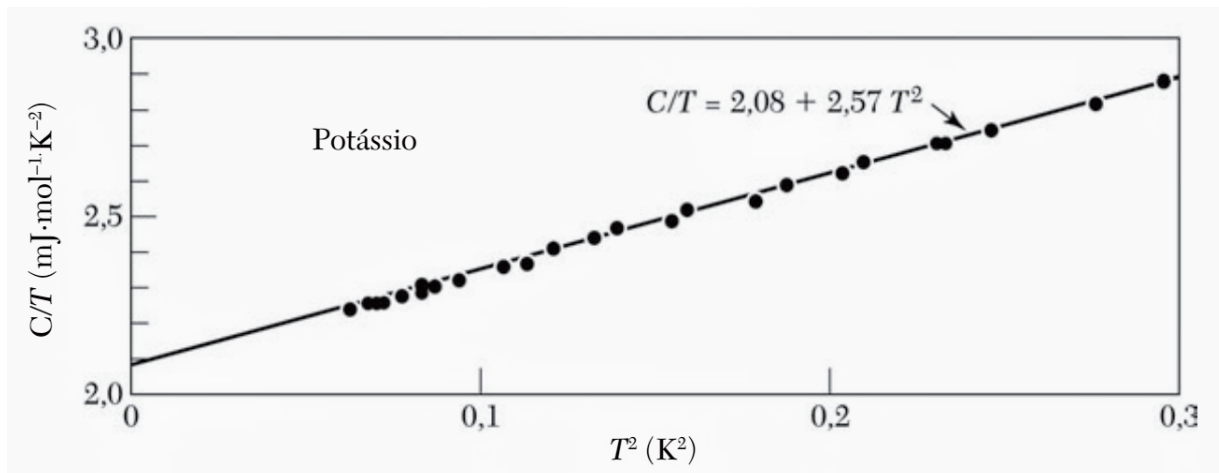
e

$$\alpha = \frac{12\pi^4 k_B}{5T_D^3} \quad (3.26)$$

Como γ é proporcional à massa eletrônica através da densidade de estados $D(E)$ equação (3.14), a determinação experimental de γ permite determinar uma “massa efetiva térmica“ dos elétrons no sólido. Tipicamente, mede-se a capacidade térmica em diversas temperaturas e determina-se γ pelo coeficiente linear em um gráfico de C/T em termos de T^2 . Teremos um gráfico linear como mostra a figura (3.2), onde o coeficiente linear da curva determina α e a intersecção com a coordenada T^2 determina o valor de γ . A Fig.(3.2) representa o gráfico C/T x T^2 .

Como a temperatura de Fermi é inversamente proporcional à massa m do elétron, o coeficiente γ é proporcional a m . A diferença entre o resultado teórico e experimental pode ser explicada

Figura 3.2. Capacidade Térmica valor experimental do Potássio.



Fonte: Kittel [39]

admitindo que os elétrons de condução no metal possuem uma massa efetiva m^* , que podemos definir como

$$m^* = \frac{\gamma^*}{\gamma} m \quad (3.27)$$

Assim podemos descrever os elétrons de condução em um metal como sendo elétrons livres, mas com uma massa efetiva que carrega a informação sobre as interações que ele está sujeito no material em questão. O valor da razão γ^*/γ , pode ser encontrado em [39], onde γ^* é a capacidade térmica eletrônica observada experimentalmente e o coeficiente γ dado por (3.25) para vários metais.

Apesar de todo sucesso o modelo de Sommerfeld baseado nas ideias de Drude, este modelo possui algumas inconsistências, como alguns sólidos serem condutores e outros não, entre outros, porém para corrigir estes erros presentes nos modelos de Drude e Sommerfeld as interações entre os elétrons de condução e os íons têm que ser levadas em consideração.

3.4 Modelo de Condução de Bloch

Vamos considerar um sólido cristalino. Em um cristal, o arranjo interno dos átomos, íons ou moléculas é disposto de forma ordenada. Um potencial periódico pode ser usado para descrever a interação de um elétron com os íons de um cristal. O modelo de condução de Bloch [40] propõe que os elétrons se movimentem em um condutor metálico com um potencial periódico, sendo a energia cinética dos elétrons muito menor que a interação do potencial.

Vamos chamar $U(r)$ o potencial que atua sobre um elétron na posição r . Devemos lembrar que $U(r)$ é devido somente aos íons da rede e que a interação entre elétron-elétron não será levada em conta. Portanto os estados estacionários de um único elétron em função de um potencial periódico podem ser obtidos através da equação de Schrödinger expressa por

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi = E\psi \quad (3.28)$$

Como os íons da rede ocupam posições regulares implica uma periodicidade espacial do potencial $U(r)$, sabemos que a periodicidade cristalina nos impõe que

$$U(r + R) = U(r) \quad (3.29)$$

onde R é um vetor da rede de Bravais. As estruturas cristalinas definidas como cristais perfeitos, são estruturas que apresentam características básicas determinadas por arranjos cristalinos regulares, tridimensionais descritos rigorosamente pelas redes de Bravais [41].

As soluções da equação de Schrödinger (3.28) com um potencial periódico são representados como soluções de ondas planas, e é dada da seguinte forma

$$\psi_k(r) = u_k(r) e^{ik \cdot r} \quad (3.30)$$

com

$$u_k(r) = u_k(r + R) , \quad (3.31)$$

A equação (3.30) é conhecida como o teorema de Bloch. Relacionando as expressões (3.30) e (3.31) tem-se a seguinte equação

$$\psi_k(r + R) = u_k(r + R)e^{ik \cdot r} e^{ik \cdot R} \quad (3.32)$$

$$, \psi_k(r + R) = \psi_k(r)e^{ik \cdot R} , \quad (3.33)$$

onde esta expressão representa uma forma alternativa do teorema de Bloch. Com isso, a equação de autovalores de energia apresenta-se da seguinte forma

$$H\psi_k(r) = E_k\psi_k(r) \quad (3.34)$$

onde H é a hamiltoniana de um único elétron e é expressa por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} + U(r) \quad (3.35)$$

Na forma (3.30) o teorema de Bloch exhibe uma propriedade notável a respeito de elétrons em um potencial periódico, a de que esses elétrons podem se comportar como partículas "livres", com uma função de onda essencialmente igual a uma onda plana, modulada em amplitude pela função $u_k(r)$.

O estudo dos níveis de energia de uma partícula em um único poço de potencial quântico é uma das questões elementares da física quântica, resolvido na seção 2.6. Da mesma forma que, um dos problemas elementares da utilização do teorema de Bloch é a compreensão da banda de energia ao qual uma partícula encontra-se em movimento em um arranjo periódico de poços quânticos. O modelo de poços quadrados de potencial quântico com repetição periódica foi introduzido por Kronig e Penney [42].

F. Bloch, através de seu modelo de condução, deu uma importante contribuição conceitual para

melhor compreendermos o universo da física do estado sólido, ao explicar várias propriedades referentes aos materiais cristalino usando a teoria quântica como fundamento. A distinção conceitual de condutor, semicondutor e isolante foi proposto inicialmente no ano de 1931 por Alan H. Wilson [43].

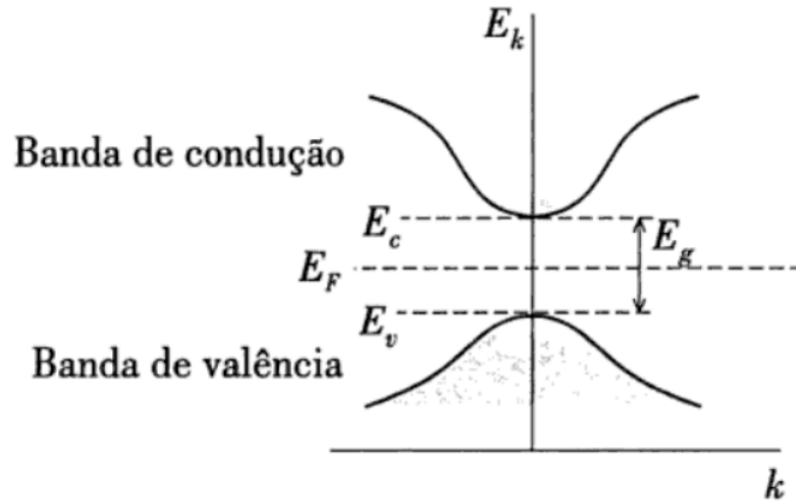
3.5 Os Semicondutores

O semicondutor é um material semelhante ao isolante, mas com um gap de energia pequeno o suficiente, de modo a permitir que elétrons possam ser excitados termicamente e saltar para a banda superior, onde existem estados disponíveis para serem ocupados. Por exemplo, o silício tem $E_{gap} = 1,1 \text{ eV}$ e é um semicondutor, enquanto o diamante, que tem a mesma estrutura do Si por átomos de carbono, tem $E_{gap} = 5 \text{ eV}$, sendo um ótimo isolante.

Para isso é necessário que a diferença de energia entre a banda de condução e a energia de Fermi, que está localizada no meio do gap, ver figura (3.3), deve ser $\Delta E_F \gg k_B T$, e tanto os elétrons na banda de condução quanto os buracos deixados na banda de valência contribuem para a condutividade elétrica. A condutividade do material depende do número de elétrons que passam para a banda de condução, o que pode ser calculado probabilisticamente, este número é tanto maior quanto maior for a temperatura e quanto menor for a energia que separa as duas bandas. Nos metais o aumento da temperatura faz com que sua resistividade diminua, já no semicondutor acontece o contrário. A concentração de elétrons na banda de condução de um semicondutor puro varia exponencialmente com a temperatura, o que faz sua condutividade depender fortemente da temperatura. Semicondutores puros são chamados de intrínsecos. A condutividade dos semicondutores também pode ser drasticamente alterada com a presença de impurezas, ou seja, de átomos diferentes dos que compõem o cristal puro. Semicondutores com impurezas são chamados de extrínsecos.

Assim, os semicondutores possuem um grande destaque no estudo da FMC, possuindo propriedades elétricas especiais, esses materiais formam a base de uma vasta indústria de dispositi-

Figura 3.3. Bandas de valência e de condução em semicondutores. As regiões hachuradas representam a ocupação dos elétrons em $T > 0$. A distância entre as bandas é o gap de energia E_g .



Fonte: S.M. Rezende [35]

vos eletrônicos, como diodos, transistores, etc. E que atualmente o grafeno está recebendo bastante atenção, produzido em laboratório é um material que deve estar presente em boa parte dos eletrônicos no futuro. Ele é constituído de átomos de carbono e possui propriedades de transporte distintas daquelas observadas em outros materiais.

Para obtermos a equação de movimento para um elétron em uma banda de energia vamos olhar para o movimento de um pacote de onda sujeito a um campo elétrico. A velocidade de grupo é definida como

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (3.36)$$

onde $E = \hbar\omega$ e ω é a frequência do pacote de ondas. O trabalho realizado por uma força externa f sobre um elétron da banda em um tempo δt será

$$\delta E = f v_g \delta t \quad (3.37)$$

escrevendo δE como

$$\delta E = \frac{dE}{dk} \delta k = \hbar v_g \delta k \quad (3.38)$$

fazendo $\delta \rightarrow 0$, obteremos a seguinte expressão

$$\hbar \frac{dk}{dt} = f \quad (3.39)$$

ou

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{f} \quad (3.40)$$

Este resultado mostra que a força externa aplicada a um elétron é igual a $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$ em um cristal. A partir deste resultado pode-se derivar uma expressão para a massa, que agora será uma massa efetiva m^* , que vai descrever as cargas se deslocando no cristal. Portanto,

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (3.41)$$

isolando $\frac{dk}{dt}$

$$\frac{dk}{dt} = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \frac{dv_g}{dt} \quad (3.42)$$

e que

$$f = \hbar \frac{dk}{dt} = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \frac{dv_g}{dt} = m^* a \quad (3.43)$$

e a massa efetiva será dada por

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (3.44)$$

ou

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (3.45)$$

A massa efetiva é uma maneira conveniente de descrever o movimento de cargas em cristais, principalmente por levar em consideração as diferentes bandas de energia, para as diferentes direções, já que é dependente da energia.

3.6 Equação de Schrödinger com Massa Efetiva

No capítulo (2) vimos um resumo sobre a MQ e a equação de Schrödinger independentem do tempo para um partícula com massa constante, e como exemplo fizemos um exercício clássico em MQ que é o poço quadrado infinito e o efeito túnel usando os conceitos apresentados.

A Equação de Schrödinger apresentada descreve a evolução temporal de um estado quântico de um dado sistema físico. Essa equação tem importância na teoria quântica, assim como as Leis de Newton tem importância na Mecânica Clássica. Contudo, ao longo dos anos, surgiram problemas que levaram a escrever a equação de Schrödinger com uma massa efetiva, assim podemos escrever a equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.46)$$

fazendo $V(x) = 0$, e a energia se torna

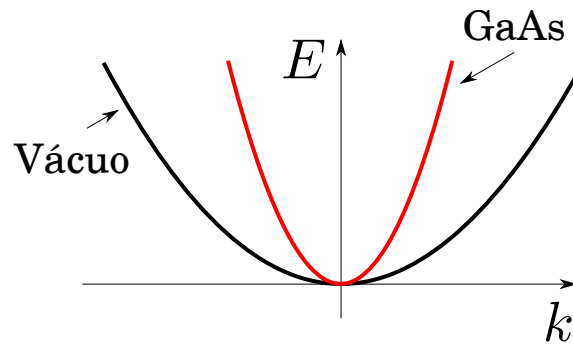
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3.47)$$

Esta relação de dispersão para elétrons livres, agora com aproximação da massa efetiva nos mostra que o termo k^2 é responsável pela curvatura da relação $E \sim k^2$, ou seja como a massa mudou a curvatura da relação de dispersão também de acordo a Fig. (3.4), para um semiconductor GaAs a massa efetiva é em torno de $0.067m_0$, onde m_0 é a massa do elétron, a figura mostra a relação de dispersão com a massa efetiva em comparação com o elétron no vácuo.

A massa efetiva ser menor que a massa do elétron não significa que o cristal está menos pesado. O que acontece é que um elétron em um potencial periódico na presença de um campo elétrico ou um campo magnético aplicado é acelerado em relação à rede cristalina como se sua massa fosse igual a massa efetiva.

Este capítulo introduziu de forma resumida o comportamento de elétrons em metais, isolantes e semicondutores, onde o foco aqui foi a introdução da massa efetiva. Nos próximos capítulos iremos introduzir a equação de Schrödinger com massa efetiva variável, apresentando os Hamiltonianos

Figura 3.4. Gráfico de E versus k , relação de dispersão do elétron no vácuo e no composto GaAs com massa efetiva.



Fonte: Autor, 2016.

com massa dependente da posição.

Capítulo 4

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COM MASSA EFETIVA VARIÁVEL

Neste capítulo estudaremos a equação de Schrödinger com massa efetiva variável, que agora poderemos ter uma massa dependente da posição, os estudos nessa área foi de extrema intensidade visto ainda que é um problema aberto na física.

4.1 Introdução

Uma consequência do modelo de massa efetiva é a possibilidade de termos uma massa efetiva dependente da posição. Isso acontece, por exemplo, se considerarmos semicondutores não uniformes ou uma junção de dois materiais que tenham massas efetivas diferentes, que é o caso que iremos tratar ao longo desse capítulo. Sistemas analíticos onde a massa dependa da posição tem despertado o interesse de muitos autores, em situações onde se considera a massa efetiva dependente da posição, há reconhecidamente certa ambiguidade de ordenamento do operador energia cinética na equação de Schrödinger. Na formulação do operador hamiltoniano a massa é geralmente

constante, o hamiltoniano de energia cinética padrão da mecânica quântica é escrito como

$$H = \vec{p}^2/2m \quad (4.1)$$

que é válido quando a massa m é constante. Porém soluções de problemas quânticos em que a massa apresenta dependência espacial têm despertado interesse recentemente em várias áreas da física, como em questões relacionados a hermiticidade do operador hermitiano e a física atômica e molecular [45], os problemas relativísticos [46] e também na física do estado sólido [47].

A questão mais fundamental está na não comutatividade da massa, onde agora, o operador momento não comutar com a massa dependente da posição, fazendo com que a energia cinética não seja um operador hermitiano, que resulta na ambiguidade de ordenamento da representação do operador cinético.

Esse assunto da indução já foi cuidadosamente investigado na literatura em diferentes contextos.

4.2 Hamiltonianos Com Massa Dependente da Posição

Com isso é necessário alterar H para que ele satisfaça os requisitos impostos pela mecânica quântica para um operador que descreve um observável físico. Para representar o operador energia cinética ambíguo, considera-se o ordenamento geral proposto por Von Roos [19],

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{4} \left(m^\alpha(x) \vec{\nabla} m^\beta(x) \vec{\nabla} m^\gamma(x) + m^\gamma(x) \vec{\nabla} m^\beta(x) \vec{\nabla} m^\alpha(x) \right) , \quad (4.2)$$

onde $m(x)$ é a massa dependente da posição, usamos o operador momento da forma $p = -i\hbar\vec{\nabla}$ e os termos α , β e γ são constantes e recebem o nome de parâmetro de ordenamento ambíguo de Von Roos. Estes parâmetros satisfazem a relação

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \quad (4.3)$$

A escolha destes parâmetros está relacionada a questão quanto à hermiticidade do operador energia cinética. Ainda não existe um acordo a respeito de qual escolha para os parâmetros é a mais adequada. E deve-se levar em conta não somente as condições de continuidade com os limites de heterojunção abrupta, mas também a massa dependente da posição e a forma do potencial fazendo com que o uso desses parâmetros seja muito subjetivo.

Questões envolvendo ambiguidade e ordenamento de parâmetros, pode ser encontrado na literatura como em [48] onde o operador energia cinética é escrito incluindo a possibilidade do ordenamento de Weyl. Para o caso de baixas energias é proposto o uso da equação de Dirac [49] para contornar esse problema, e os resultados obtidos estão de acordo com aquele usando o ordenamento de BenDaniel e Duke [50] que será visto posteriormente. Trataremos somente a parte cinética dos Hamiltonianos, estudos sobre mudança no potencial pode ser estudado nesses artigos citados.

Muitas expressões para o hamiltoniano cinético que levam em conta a dependência na posição da massa efetiva foram propostas, a primeira delas foi feita em 1966 por BenDaniel e Duke [50], baseando-se no modelo de um elétron (Bethe-Sommerfeld), onde esse modelo é generalizado e é calculado sua condutância através da junção abrupta do GaAs, incorporando casos com materiais com massas diferentes. O autor também propõe um modelo suficientemente simples das junções para produzir barreiras de potenciais para os quais a equação de Schrödinger para um elétron pode ser resolvidas analiticamente, para os quais não é imposta à aproximação WKB. Eles concluíram que para manter a conservação de corrente em uma junção de dois materiais com massas efetivas diferentes, o operador (energia cinética) deveria ser substituído pelo Hamiltoniano hermitiano para o modelo de um elétron adequado dado por,

$$H_{BD} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(x)} \vec{\nabla} , \quad (4.4)$$

Esse operador é mais utilizado quando temos uma variação abrupta na massa, como acontece na junção de dois materiais diferentes, embora existam outros operadores que são adequados para este caso. Se fizermos ($\alpha = \gamma = 0$ e $\beta = -1$) em (4.2) obteremos a equação (4.1).

Em 1969, Gora e Williams [51] propõe um Hamiltoniano efetivo que em primeiro caso não é hermitiano, assim problemas de valores próprios e a ortogonalidade gerados por esse Hamiltoniano efetivo devem ser resolvidos. Então propuseram uma simetrização no operador para torná-lo hermitiano de forma que

$$H_{GW} = -\frac{\hbar^2}{4} \left[\frac{1}{m(x)} \vec{\nabla}^2 + \vec{\nabla}^2 \frac{1}{m(x)} \right], \quad (4.5)$$

os autores da equação (4.5) discutiram que outros tipos de simetrizações são possíveis, variando as constantes da equação (4.3), gerando discussão sobre o tema da existência de um único operador de energia cinética com massa dependente da posição. Para obter o Hamiltoniano padrão de massa constante da equação (4.1), devemos fazer ($\alpha = -1, \beta = \gamma = 0$) na equação (4.2).

Em 1982, Zhu e Kroemer [52] estudando regras de conexão da função de onda de massa efetiva através de uma heterojunção abrupta entre dois semicondutores diferentes expressando os resultados de uma aproximação de ligação forte (*tight – binding*) em um sistema unidimensional em termos das funções de onda de massa efetiva. O problema é reformulado extrapolando as funções de onda com massa efetiva nos dois lados da heterojunção através da interface, tratando agora o problema como se os semicondutores fossem homogêneos. Antes de resolver o problema os autores escreveram o Hamiltoniano com massa efetiva da seguinte forma

$$H = \frac{1}{2m_{eff}} \hat{p}^2, \quad (4.6)$$

que não é hermitiano. Então para evitar problemas como conservação da matéria na interface da heterojunção, é proposto um Hamiltoniano que consiste em quebrar a massa em duas partes da seguinte forma

$$H_{ZK} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \vec{\nabla}^2 \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \quad (4.7)$$

Esse mesmo operador foi obtido depois [53] no limite não relativístico do hamiltoniano de Dirac com massa dependente da posição através de uma transformação de Foldy-Wouthuysen. E mais

uma vez para obter a equação (4.1) devemos fazer ($\alpha = \gamma = -1/2$, e $\beta = 0$) na equação (4.2).

Outra proposta foi feita por Morrow e Brownstein em 1984 [54], que estudaram as condições da função de onda em um modelo de hamiltoniano de massa efetiva para heterojunções abruptas, para dois casos onde ($\alpha \neq \gamma$) concluíram que a função de onda deve se anular na junção implicando, assim, que a junção funciona como uma barreira impenetrável. E para ($\alpha = \gamma$) que é o único caso viável onde a função de onda é contínua através da junção. Portanto o Hamiltoniano será escrito da seguinte forma

$$H_{MB} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[m^\alpha(x) \vec{\nabla} m^\beta(x) \vec{\nabla} m^\alpha(x) \right] \quad (4.8)$$

que é hermitiano, e que é uma subclasse do operador de Von Ross fazendo ($\gamma = \alpha$) na equação (4.2).

Um caso particular do operador (4.8) foi sugerido por Mustafa e Mazharimousavi em 2010 [55] usando um modelo quântico para o elétron quase livre, $V(x) = 0$, uma nova ordenação conjunto de parâmetros de ambiguidade é dado por ($\alpha = \gamma = -1/4$, e $\beta = -1/2$) e é calculado os coeficientes de reflexão e de transmissão desse modelo.

Em 1993, Li e Khun [56] estudando modelos já conhecidos dos Hamiltonianos hermitinaos (4.4), (4.5), (4.6) e (4.8) sugeriu um esquema de permutação simples para poder construir um Hamiltoniano com massa dependente da posição, onde este novo Hamiltoniano apresenta um perfil suavizado que permite modelar de forma mais precisa as heterojunções. Portanto teremos

$$H_{LK} = -\frac{\hbar^2}{4} \left[m^\alpha(x) \vec{\nabla} m^\beta(x) \vec{\nabla} + \vec{\nabla} m^\beta(x) \vec{\nabla} m^\alpha(x) \right] , \quad (4.9)$$

Esse operador é uma subclasse do operador de Von Roos com $\gamma = 0$ que foi proposto por Dutra e Almeida [48], que é uma extensão do operador de Li e Khun, Dutra e Almeida mostra também que o operador proposto por Li e Khun é equivalente ao operador com três termos proposto por Weyl na forma

$$H_W = -\frac{\hbar^2}{8} \left[\frac{1}{m(x)} \vec{\nabla}^2 + 2\vec{\nabla} \frac{1}{m(x)} \vec{\nabla} + \vec{\nabla}^2 \frac{1}{m(x)} \right] , \quad (4.10)$$

Este operador não é um caso particular do operador de Von Roos.

Na referência [48], é encontrado uma forma de colocar todos os operadores descritos aqui em uma única expressão, e é dado por

$$H = \frac{1}{4(\mathbf{a} + 1)} \left(\mathbf{a} \left[\frac{1}{m(x)} \vec{p}^2 + \vec{p}^2 \frac{1}{m(x)} \right] + m^\alpha(x) \vec{p} m^\beta(x) \vec{p} m^\gamma + m^\gamma(x) \vec{p} m^\beta(x) \vec{p} m^\alpha \right), \quad (4.11)$$

que se fizermos $\mathbf{a} = 0$ iremos recuperar a expressão dada por Von Roos (4.2). E para os outros Hamiltonianos aqui citados é só utilizar os parâmetros de cada equação, lembrando que esse assunto avançou muito pouco nos últimos anos e ainda é um problema aberto na física. Resumindo, a tabela abaixo mostra as parametrizações e os problemas em que foram citadas no capítulo.

Tabela 4.1: Tabela de parâmetros

Autor	Parâmetros	Aplicação
BenDaniel e Duke	$\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$	tunelamento em semicondutores
Gora e Williams	$\alpha = -1, \gamma = \beta = 0$	transporte eletrônico
Zhu e Kroemer	$\alpha = \gamma = 1/2, \beta = 0$	condição de contorno em interfaces
Morrow e Brownstein	$\alpha = \gamma, 2\alpha + \beta = -1$	heterojunções abruptas
MM	$\alpha = \gamma = -1/4, \beta = -1/2$	ordenamento do hamiltoniano
Li e Kuln	$\alpha = 0, \gamma = \beta = -1/2$	poços quânticos (GaAs)

Fonte: Autor, 2016.

4.3 Heteroestrutura com Massa dependente da posição

Esta seção tem como objetivo calcular a estrutura de bandas de uma heteroestrutura composta por dois metais, usando primeiramente um hamiltoniano adequado com os parâmetros, \mathbf{a} , α , β , γ , imposta pela equação (4.11), e o mesmo cálculo será feito no novo modelo proposto por Lima [1], onde esse novo hamiltoniano não depende de parâmetros e não está incluído na família de operadores dado por (4.11).

Para estudarmos a dinâmica quântica de um sistema periódico com massa efetiva dependente da posição. Partiremos do operador de energia cinética dado em (4.11), para obter as bandas de energia

de uma heteroestrutura, onde temos saltos periódicos da massa, devemos ter, $\mathbf{a} = 0$. A dinâmica quântica de partículas com massa dependente da posição é um problema de interesse, uma vez que a abordagem da massa efetiva para carregar transportadores em condutores e semicondutores começou a ser usada. Estes problemas foram resolvidos usando o Hamiltoniano abaixo, com uma certa escolha de parâmetros.

$$H_{cin} = -\frac{\hbar^2}{4}(m^\alpha \vec{\nabla} m^\beta \vec{\nabla} m^\gamma + m^\gamma \vec{\nabla} m^\beta \vec{\nabla} m^\alpha) , \quad (4.12)$$

Onde $m = m(x)$ é a massa efetiva dependente da posição de um elétron na banda de condução e os termos desse operador são escolhidos de forma a torná-lo hermitiano, pois a massa não permuta com o momento. As constantes α, β e γ são arbitrárias e reais que obedecem a condição

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 , \quad (4.13)$$

já discutido na seção anterior. Não existe um acordo a respeito de qual escolha para os parâmetros é a mais adequada, alguns trabalhos trazem escolhas para esses parâmetros de forma subjetiva.

Em uma dimensão, a Eq. (4.12) se torna

$$H_{cin} = \frac{1}{4}(m^\alpha \vec{p} m^\beta \vec{p} m^\gamma + m^\gamma \vec{p} m^\beta \vec{p} m^\alpha) , \quad (4.14)$$

onde \vec{p} é o operador momento dado por $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$. Fazendo $\alpha = \gamma$ na Eq. (4.14), para termos o problema de uma heteroestrutura com saltos periódicos, a equação se torna

$$H_{cin} = \frac{1}{4}(m^\alpha p m^\beta p m^\alpha + m^\alpha p m^\beta p m^\alpha) = \frac{1}{4}(2m^\alpha p m^\beta p m^\alpha) = \frac{1}{2}(m^\alpha p m^\beta p m^\alpha)$$

$$H_{cin} = \frac{1}{2}m^\alpha p m^\beta p m^\alpha , \quad (4.15)$$

Tratando o problema de uma partícula quântica livre com massa efetiva dependente da posição e

usando a equação de Schrödinger, $H\psi = E\psi$, temos

$$\left[\frac{1}{2} m^\alpha(x) p m^\beta(x) p m^\alpha(x) \right] \psi = E\psi ,$$

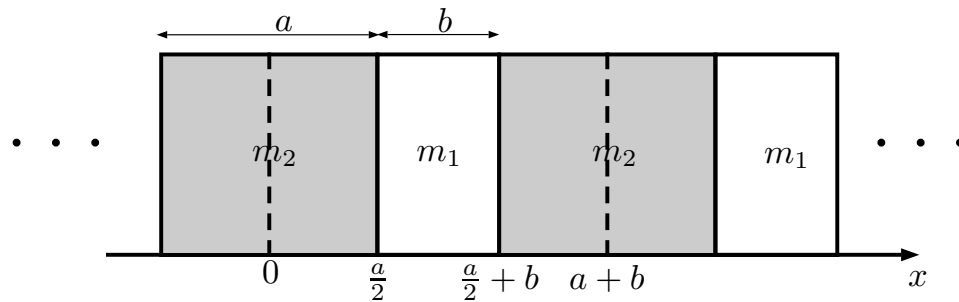
$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) \right] \psi = E\psi ,$$

ou ainda

$$\left[m^\alpha(x) \frac{d}{dx} m^\beta(x) \frac{d}{dx} m^\alpha(x) \right] \psi = \frac{-2E}{\hbar^2} \psi \quad (4.16)$$

Primeiro iremos aplicar ondas planas no cálculo da heteroestrutura, para a relação de dispersão, e posteriormente comparar com o modelo descrito por [1]. onde a massa muda periodicamente com a distância, possuindo periodicidade $a + b$, bem como os valores permitidos para tal estrutura. Fig. (4.1).

Figura 4.1. Heteroestrutura periódica com dois tipos de materiais, m_1 e m_2 . Em uma aproximação envolvendo massa efetiva, tratamos uma partícula quântica “livre” com saltos periódicos de massa.



Fonte: Autor, 2016.

Como temos saltos periódicos da massa, a função de onda ψ satisfaz o teorema de Bloch, ou seja,

$$\psi(x + n(a + b)) = e^{ikn(a+b)} \psi(x) , \quad (4.17)$$

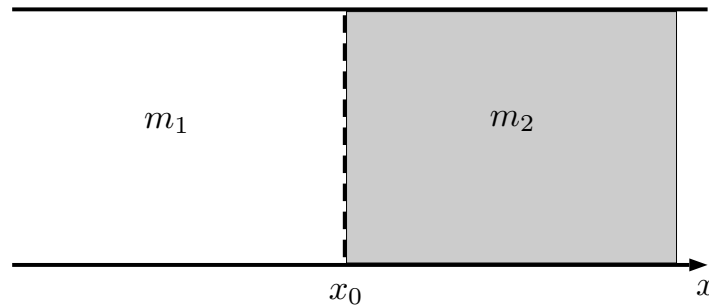
e

$$\psi'(x + n(a + b)) = e^{ikn(a+b)}\psi'(x) , \quad (4.18)$$

onde k é o número de onda, n é um inteiro e $\psi' = \frac{d\psi}{dx}$. Reduziremos o problema a uma célula unitária $0 \leq x \leq (a+b)$ na rede direta.

Para iniciarmos o cálculo da relação de dispersão, primeiramente devemos encontrar as condições de contorno na interface entre duas regiões de massa m_1 e m_2 . Para isso, integramos a equação de Schrödinger, Eq. (4.16), em um intervalo $(x_0 - \epsilon)$ e $(x_0 + \epsilon)$ em torno de um ponto x_0 Fig. (4.2).

Figura 4.2. Interface no ponto x_0 entre dois materiais com diferentes massas, m_1 e m_2 .



Fonte: Autor, 2016.

Resolvendo a equação de Schrödinger com essas condições iremos encontrar a seguinte equação,

$$\left[m^{\alpha+\beta} \frac{d}{dx} m^\alpha \psi \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} + (m_1^\alpha - m_2^\alpha) \left(\frac{\psi'^+}{2} m_2^{\alpha+\beta} + \frac{\psi'^-}{2} m_1^{\alpha+\beta} \right) = -\frac{2E}{\hbar^2} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi dx. \quad (4.19)$$

para resolvemos (4.19) usamos o fato que

$$\psi(x)\delta(x - x_0) = \frac{\psi(x_0^+) + \psi(x_0^-)}{2} \delta(x - x_0), \quad (4.20)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = x_0 \\ 0, & \text{se } x \neq x_0 \end{cases} \quad (4.21)$$

e também que

$$m(x)^\lambda = m_1^\lambda H(x_0 - x) + m_2^\lambda H(x - x_0), \quad (4.22)$$

onde H é a função de Heaviside, imposta como,

$$H(x - x_0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < x_0 \\ 1, & \text{se } x > x_0 \end{cases} \quad (4.23)$$

e λ um número real.

Tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$, podemos encontrar a condição de contorno no ponto x_0 tanto entre $\psi(x_0^+)$ e $\psi(x_0^-)$ (o sinal + e - representam a função imediatamente a direita e a esquerda do ponto x_0 , respectivamente) como para $\psi'(x_0^+)$ e $\psi'(x_0^-)$, seguindo [1].

Essas condições de contorno são dadas abaixo

$$\psi\left(\frac{a^+}{2}\right) = \mu\psi\left(\frac{a^-}{2}\right), \quad \psi\left(\frac{a}{2} + b^+\right) = \varrho\psi\left(\frac{a}{2} + b^-\right), \quad (4.24)$$

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right) = \rho\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right), \quad \psi'\left(\frac{a}{2} + b^+\right) = \sigma\psi'\left(\frac{a}{2} + b^-\right), \quad (4.25)$$

onde μ , ϱ , ρ e σ são dados por

$$\mu = \frac{m_1 + m_2^{\alpha+1} m_1^{\alpha+\beta+1}}{m_2 + m_1^{\alpha+\beta} m_2^{\alpha+\beta+1}}, \quad \varrho = \frac{m_2 + m_1^{\alpha+1} m_2^{\alpha+\beta+1}}{m_1 + m_2^{\alpha+\beta} m_1^{\alpha+\beta+1}} \quad (4.26)$$

$$\rho = \frac{m_1 + m_1^{\alpha+1} m_2^{\alpha+\beta+1}}{m_2 + m_2^{\alpha+\beta} m_1^{\alpha+\beta+1}}, \quad \sigma = \frac{m_2 + m_2^{\alpha+1} m_1^{\alpha+\beta+1}}{m_1 + m_1^{\alpha+\beta} m_2^{\alpha+\beta+1}}, \quad (4.27)$$

Da equação de Schrödinger para três regiões na célula unitária vamos propor alternativo ao trabalho de Lima [1], a seguinte solução

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iq_1x} + Be^{-iq_1x} & 0 \leq x < \frac{a}{2}, \\ Ce^{iq_2x} + De^{-iq_2x} & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b, \\ Ee^{iq_1x} + Fe^{-iq_1x} & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} \quad (4.28)$$

Como nosso sistema não pode ter perdas ou dissipação de energia, propomos a solução de ondas planas. onde A, B, C, D, E e F são constantes complexas a serem determinada pelas condições de contorno (4.24) e (4.25) e $q_i = \frac{\sqrt{2m_iE}}{\hbar}$. Tomando a derivada da Eq. (4.28) com respeito a x , temos

$$\psi'(x) = \begin{cases} iq_1Ae^{iq_1x} - iq_1Be^{-iq_1x} & 0 \leq x < \frac{a}{2}, \\ iq_2Ce^{iq_2x} - iq_2De^{-iq_2x} & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b, \\ iq_1Ee^{iq_1x} - iq_1Fe^{-iq_1x} & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} \quad (4.29)$$

Utilizando as condições de contorno dado pelas Eqs. (4.24) e (4.25), temos

$$C = \frac{1}{2} \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) Ae^{i\frac{a}{2}(q_1-q_2)} + \frac{1}{2} \left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) Be^{-i\frac{a}{2}(q_1+q_2)} \quad (4.30)$$

$$D = \frac{1}{2} \left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) Ae^{i\frac{a}{2}(q_1+q_2)} + \frac{1}{2} \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) Be^{-i\frac{a}{2}(q_1-q_2)} \quad (4.31)$$

$$E = \frac{1}{2} \left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) Ce^{-i(\frac{a}{2}+b)(q_1-q_2)} + \frac{1}{2} \left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) De^{-i(\frac{a}{2}+b)(q_1+q_2)} \quad (4.32)$$

$$F = \frac{1}{2} \left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) Ce^{i(\frac{a}{2}+b)(q_1+q_2)} + \frac{1}{2} \left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) De^{i(\frac{a}{2}+b)(q_1-q_2)}. \quad (4.33)$$

Da relação de Bloch, Eqs. (4.17) e (4.18), temos

$$Ee^{iq_1(a+b)} + Fe^{-iq_1(a+b)} = e^{-ik(a+b)}(A + B) , \quad (4.34)$$

$$Ee^{iq_1(a+b)} - Fe^{-iq_1(a+b)} = e^{ik(a+b)}(A - B) , \quad (4.35)$$

Como já temos as constantes C , D , E e F agora nós vamos substituir na equação acima a fim obtermos E e F em termos de A e B , ou seja, utilizaremos as relações de Bloch de forma que teremos duas equações e duas incógnitas para ser resolvido, então todo o termo multiplicado aos coeficientes A e B será constante, de forma que só a expressão $e^{ik(a+b)}$ irá variar, portanto obteremos as seguintes expressões para facilitar nosso cálculo, determinamos as seguintes constantes

$$C_1 = \frac{(q_1 \varrho + \sigma q_2)(q_2 \mu + \rho q_1) e^{i(aq_1 + bq_2)} + (q_1 \varrho - \sigma q_2)(q_2 \mu - \rho q_1) e^{i(aq_1 - bq_2)}}{4q_1 q_2}, \quad (4.36)$$

$$C_2 = \frac{(q_1 \varrho - \sigma q_2)(q_2 \mu - \rho q_1) e^{ibq_2} + (q_1 \varrho + \sigma q_2)(q_2 \mu - \rho q_1) e^{-ibq_2}}{4q_1 q_2}, \quad (4.37)$$

$$C_3 = \frac{(q_1 \varrho + \sigma q_2)(q_2 \mu + \rho q_1) e^{ibq_2} + (q_1 \varrho - \sigma q_2)(q_2 \mu + \rho q_1) e^{-ibq_2}}{4q_1 q_2}, \quad (4.38)$$

$$C_4 = \frac{(q_1 \varrho + \sigma q_2)(q_2 \mu - \rho q_1) e^{-i(aq_1 - bq_2)} + (q_1 \varrho - \sigma q_2)(q_2 \mu + \rho q_1) e^{-i(aq_1 - bq_2)}}{4q_1 q_2}, \quad (4.39)$$

teremos o seguinte sistema homogêneo de equações algébricas para as constantes C_1, C_2, C_3 e C_4 , nas variáveis A e B , ou seja,

$$A(C_1 + C_2 - e^{ik(a+b)}) + B(C_3 + C_4 - e^{ik(a+b)}) = 0 \quad (4.40)$$

$$A(C_1 - C_2 - e^{ik(a+b)}) + B(C_3 - C_4 + e^{ik(a+b)}) = 0 \quad (4.41)$$

A condição de (4.40) e (4.41) para não termos solução trivial é fazer o determinante da matriz dos coeficientes igual a zero. Isso nos leva a

$$\begin{vmatrix} C_1 + C_2 - e^{ik(a+b)} & C_3 + C_4 - e^{ik(a+b)} \\ C_1 - C_2 - e^{ik(a+b)} & C_3 - C_4 + e^{ik(a+b)} \end{vmatrix} = 0,$$

levando à seguinte relação

$$e^{2ik(a+b)} - C_4 e^{ik(a+b)} - C_1 e^{ik(a+b)} + C_1 C_4 - C_2 C_3 = 0,$$

substituindo as constantes (4.36) a (4.39), temos

$$\cos k(a+b) = \frac{1}{2} \left[(\rho\sigma + \varrho\mu) \cos(aq_1) \cos(bq_2) - \frac{(q_1^2 \varrho\rho + q_2^2 \sigma\mu) \sin(aq_1) \sin(aq_2)}{q_1 q_2} \right] \quad (4.42)$$

Substituindo os parâmetros de μ , ϱ , ρ e σ iremos obter a relação de dispersão de acordo com o obtido na literatura por Lima, 2012.

4.3.1 Análise Gráfica

O lado esquerdo de Eq.(4.42) é limitado ao intervalo $(-1, 1)$, o que leva o lado direito a ter valores proibidos para a energia. Isso implica a existência de bandas de energia com gaps. Para este problema iremos fixar os parâmetros $\alpha = 0$ e $\beta = -1$ [57], esta condição em um limite assintótico de energia próximo ao “band edge” se mantém iguais para os parâmetros de rede, de forma que obteremos

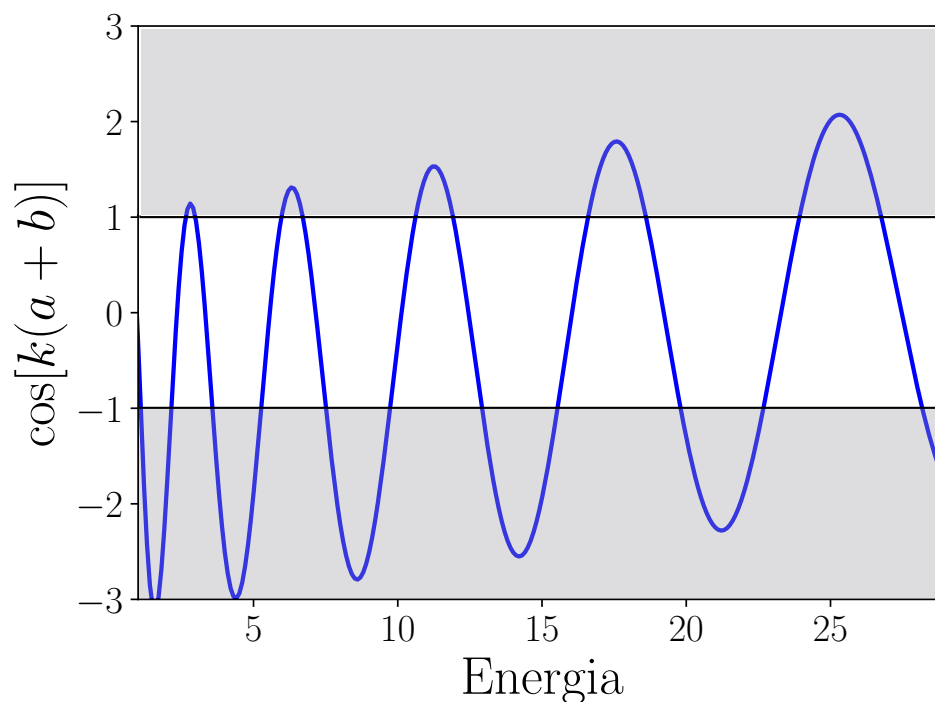
$$\mu = 1, \varrho = 1, \rho = \frac{m_1}{m_2}, \sigma = \frac{m_2}{m_1}. \quad (4.43)$$

Consideremos uma estrutura sendo formada por Ga e Pb. A massa efetiva para essas materias são $m_1 = 0,58 \times m_e$ e $m_2 = 1,97 \times m_e$, e escolhendo $a = 1\mu m$ e $b = 0,50 \times a$, onde m_e é a massa do elétron. Substituindo os parâmetros na equação da dispersão, e fazendo $m_1 = c_1 m_e$ e $m_2 = c_2 m_e$, onde $c_1 = 0.58$ e $c_2 = 1.97$ a expressão se torna

$$\cos[k(a+b)] = \cos(aq_1) \cos(bq_2) - \frac{\left(\frac{c_1 q_1^2}{c_2} \frac{c_2 q_2^2}{c_1} \right) \sin(aq_1) \sin(bq_2)}{2q_1 q_2} \quad (4.44)$$

substituindo os valores de a , b , c_1 , c_2 , m_e , \hbar , encontraremos o seguinte gráfico

A região cinza da Fig. 4.3, $|\cos[k(a+b)]| > 1$, representa a zona proibida da energia.

Figura 4.3. Gráfico da relação de dispersão com gaps de energia, energia dada em eV .

Fonte: Autor, 2016.

4.4 Modelo Alternativo para o Hamiltoniano

Tomando o modelo proposto por (Lima, 2012) para resolver problemas com massa dependente da posição, considerando a permutação entre os operadores, levando em conta que a massa é agora um operador. Temos que a massa é um operador que depende da posição, portanto, implica que a massa não comuta com o momento linear, devemos considerar todas as permutações entre o momento e o inverso da massa. Desenvolvemos o mesmo procedimento feito anteriormente fazendo uma comparação qualitativa entre esses modelos como foi feito por (Lima, 2012) e em seguida estenderemos o estudo para esse hamiltoniano estudando o processo de transferência de cargas.

4.4.1 O Hamiltoniano

Para uma partícula livre arbitrária com massa constante m , o Hamiltoniano clássico é escrito da seguinte forma, $H = \frac{p^2}{2m}$. Como vimos anteriormente, as variáveis clássicas são convertidos em operadores lineares. Para o momento e a posição, agora teremos, $p \rightarrow \hat{p}$ e $m \rightarrow \hat{m}$, respectivamente. Lembrando agora que a massa dependendo da posição os operadores \hat{m} e \hat{p} não comutam. Assim, podemos considerar todas as permutações possíveis entre \hat{p} e \hat{m}^{-1} . Portanto o Hamiltoniano proposto por Lima, 2012,

$$H = \frac{1}{6}[m(x)^{-1}p^2 + pm(x)^{-1}p + p^2m(x)^{-1}] , \quad (4.45)$$

usando (4.45) de Schrödinger, podemos escrever

$$-\frac{1}{6}\hbar^2 \left[m^{-1} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d}{dx} \left(m^{-1} \frac{d\psi}{dx} \right) + \frac{d^2}{dx^2} (m^{-1}) \right] = E\psi. \quad (4.46)$$

O Hamiltoniano Eq.(4.45) é claramente hermitiano e também garante que é compatível com a invariância Galileana, de acordo com a Eq. (3.8) seguindo os passos em [58]. Além disso, conserva a probabilidade. Agora vamos aplicar (4.46) a dinâmica quântica de uma partícula com massa periódica, como feito anteriormente.

4.4.2 Condições de Contorno

Seguindo o que foi feito na seção anterior onde aplicamos (4.46) a dinâmica quântica de uma partícula com massa periódica, iremos integrar a equação de Schrödinger no intervalo $(x_0 - \epsilon)$, $(x_0 + \epsilon)$ mostrado na figura (4.2), onde ϵ é muito pequeno. Então,

$$\left[\frac{1}{m} \psi' \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} + \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \left(\frac{\psi'(x_0^+) + \psi'(x_0^-)}{2} \right) + \left[\frac{1}{m} \psi' \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} + \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m} \psi \right) \right]_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} = -\frac{6E}{\hbar^2} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi dx. \quad (4.47)$$

Fazendo o limite $\epsilon \rightarrow 0$, nós iremos encontrar a condição de contorno para a derivada da função de onda

$$\psi'(x_0^+) = \left(\frac{m_1 + 5m_2}{5m_1 + m_2} \right) \psi'(x_0^-). \quad (4.48)$$

Usando o mesmo limite na equação de Schrödinger primitiva, teremos a condição de contorno para a função de onda, dada portanto

$$\psi(x_0^+) = \left(\frac{m_1 + 2m_2}{2m_1 + m_2} \right) \psi(x_0^-). \quad (4.49)$$

Da condições da interface (4.48) e (4.49), das condições de Bloch (4.17) e (4.18), e seguindo o conjunto de solução da equação de Schrödinger (4.24) e (4.25) para o Hamiltoniano (4.45).

$$\psi\left(\frac{a^+}{2}\right) = \omega\psi\left(\frac{a^-}{2}\right) \quad , \quad \psi\left(\frac{a}{2} + b^+\right) = \theta\psi\left(\frac{a}{2} + b^-\right), \quad (4.50)$$

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right) = \xi\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right) \quad , \quad \psi'\left(\frac{a}{2} + b^+\right) = \nu\psi'\left(\frac{a}{2} + b^-\right), \quad (4.51)$$

$$\psi(a+b) = e^{ik(a+b)}\psi(0) \quad , \quad (4.52)$$

$$\psi'(a+b) = e^{ik(a+b)}\psi'(0) \quad , \quad (4.53)$$

Onde

$$\omega = \frac{m_1 + 2m_2}{2m_1 + m_2} \quad , \quad \theta = \frac{m_2 + 2m_1}{2m_2 + m_1} \quad (4.54)$$

$$\xi = \frac{m_1 + 5m_2}{5m_1 + m_2} \quad , \quad \nu = \frac{m_2 + 5m_1}{5m_2 + m_1}. \quad (4.55)$$

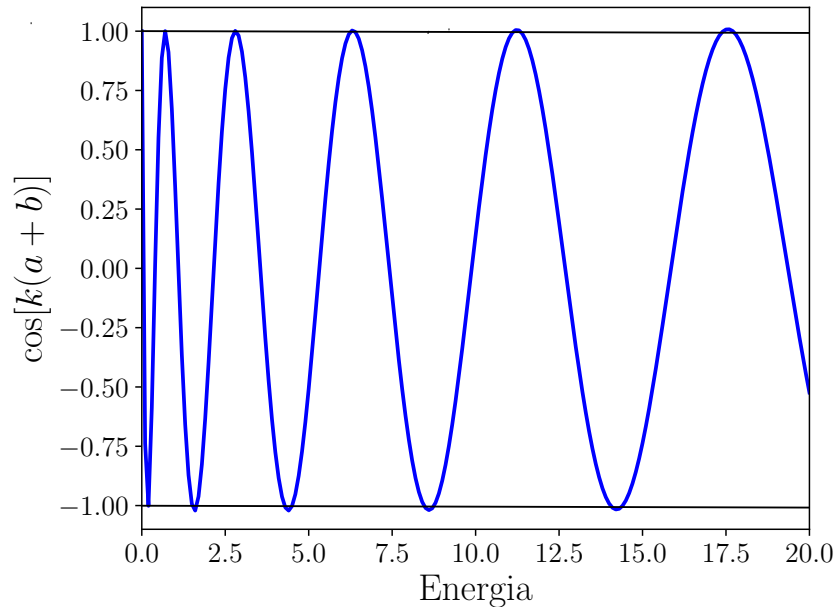
4.4.3 Bandas de Energia

Como calculado anteriormente, a relação de dispersão é dada por,

$$\cos[k(a+b)] = \cos(aq_1) \cos(bq_2) - \frac{1}{2} \left[\theta \xi \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} + \omega \nu \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \right] \sin(q_1 a) \sin(q_2 b). \quad (4.56)$$

As diferenças entre as equações Eqs. (4.42) e (4.56) aparecem devido aos coeficientes (4.54) e (4.55). Essa diferença se deve aos os coeficientes dado por (4.26) e (4.27) dependem dos parâmetros α e β . Iremos agora plotar o gráfico da relação de dispersão dado pela Eq. (4.56) usando os coeficientes (4.54) e (4.55) para os mesmo problema tratado na seção anterior, $m_1 = 0.58 \times m_e$, $m_2 = 1.97 \times m_e$, $a = 1 \times \mu m$ e $b = 0.50 \times a$.

Figura 4.4. Gráfico da relação de dispersão eq.(4.56), que mostra a dependência do termo $\cos[k(a+b)]$ e a energia.



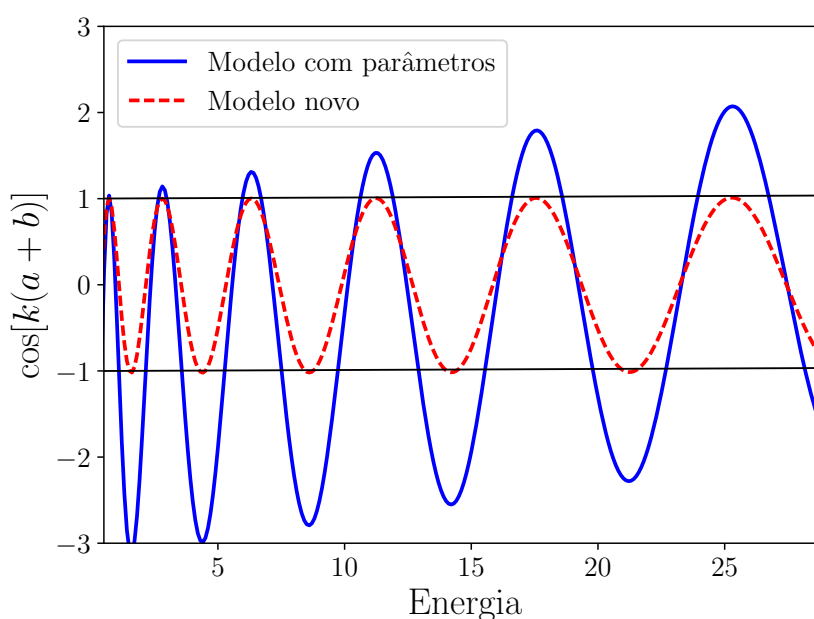
Fonte: Autor, 2016.

Novamente teremos uma estrutura de banda com regiões proibidas. Comparando os dois gráficos afim de obter qual modelo é o mais adequado para aplicação em uma estrutura com massa dependente da posição.

4.4.4 Breve Discussão

Plotando os gráficos sobrepostos da Fig.(4.3) e Fig.(4.4) em azul nós temos o primeiro modelo descrito que tem dependência dos parâmetros α , β e γ , e em vermelho nós temos o novo modelo proposto por Lima *et al.* [1], como podemos ver na Fig. 4.5.

Figura 4.5. Gráfico das duas relações de dispersões.



Fonte: Autor, 2016.

O novo modelo não é um caso particular do Hamiltoniano Eq. (4.11), pois não existe nenhuma escolha dos parâmetros α , β , γ , \mathbf{a} que leve a tal hamiltoniano. Seria preciso realizar um experimento para analisar qual deles é o mais apropriado. A Eq. (4.42) é obtido também quando se tem $V_0 = 0$ em [58]. Para o mesmo sistema analisado, percebemos que o modelo proposto é mais flexível do que o Hamiltoniano (4.11) que possui dependência dos parâmetros e esse Hamiltoniano como o primeiro possui essa dependência de acordo com a estrutura, pode-se variar os parâmetros para se adequar a estrutura. Estruturas mais complexas, como por exemplo, heteroestruturas deformadas [59], não podem ser modeladas pelos hamiltonianos aqui discutidos, sendo necessário um operador mais geral. Como aplicação Física, encontramos as minibandas de energia para uma heteroestrutura formada por Ga e Pb. Para isso, nós utilizamos dois hamiltonianos diferentes, e os

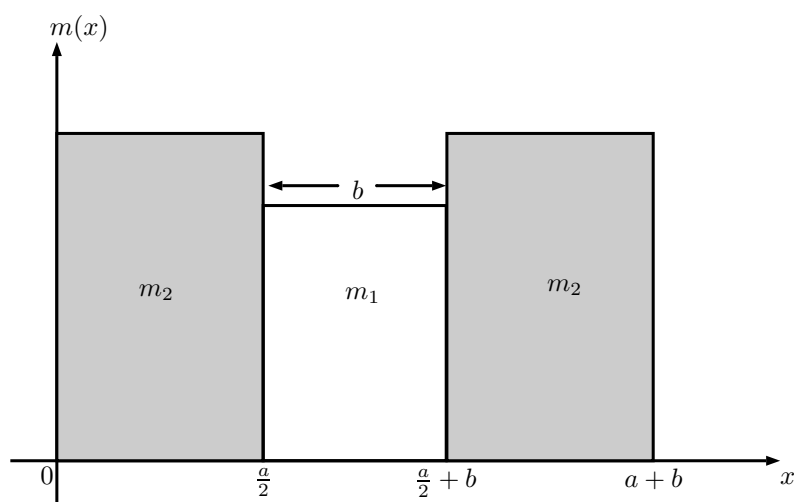
resultados encontrados mostram que os modelos são equivalentes. Para melhor efeito seria preciso um experimento para analisar qual dos modelos é melhor nesse tipo de heteroestrutura.

4.5 Cálculo da Transmissão

Até aqui seção (4.3) e (4.4) foram reproduzidos os resultados de Lima, 2012. Motivado com os resultados obtidos por Lima em sistemas com MDP, a partir dessa seção iremos calcular a transmissão e a reflexão para os dois modelos discutidos, usaremos as mesmas condições de contorno para a massa dependente da posição e discutiremos os resultados obtidos. Essa primeira parte iremos comparar os dois modelos com potencial $V_0 = 0$, ou seja, para energias maiores que o potencial $E > V_0$.

Como já calculamos as constantes C , D , E e F , vamos considerar a seguinte figura.

Figura 4.6. Gráfico da Heteroestrutura para o cálculo da transmissão.



Fonte: Autor, 2016.

A figura (4.6) representa a distribuição da massa efetiva em dois materiais diferentes, como faremos todo o estudo com potencial $V_0(x) = 0$, teremos sempre a energia acima da barreira. No domínio da física clássica quando temos a energia maior que a barreira a partícula passaria sem ser refletida, diminuindo sua energia cinética, mas iria recuperar sua velocidade inicial depois de ultrapassar a barreira. Usando as condições de contorno para a solução de Schrödinger devemos a

ter a função de onda e sua primeira derivada contínuas de uma interface para outra.

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iq_1x} + Be^{-iq_1x} & 0 \leq x < \frac{a}{2}, \\ Ce^{iq_2x} + De^{-iq_2x} & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b, \\ Ee^{iq_1x} + Fe^{-iq_1x} & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} \quad (4.57)$$

e sua derivada, temos

$$\psi'(x) = \begin{cases} iq_1Ae^{iq_1x} - iq_1Be^{-iq_1x} & 0 \leq x < \frac{a}{2}, \\ iq_2Ce^{iq_2x} - iq_2De^{-iq_2x} & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b, \\ iq_1Ee^{iq_1x} - iq_1Fe^{-iq_1x} & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} \quad (4.58)$$

Precisamos agora escrever F e E com dependência de A e B da seguinte forma

$$F = \frac{1}{4} \left[\left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{i[aq_1 + b(q_1 + q_2)]} + \left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{i[aq_1 + b(q_1 - q_2)]} \right] A \\ + \frac{1}{4} \left[\left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{ib(q_1 + q_2)} + \left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{ib(q_1 - q_2)} \right] B. \quad (4.59)$$

e

$$E = \frac{1}{4} \left[\left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{-i(q_1 - q_2)} + \left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{ib(q_1 + q_2)} \right] A \quad (4.60) \\ + \frac{1}{4} \left[\left(\mu - \rho \frac{q_1}{q_2} \right) \left(\varrho + \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) e^{-i[aq_1 + b(q_1 - q_2)]} + \left(\varrho - \sigma \frac{q_2}{q_1} \right) \left(\mu + \rho \frac{q_1}{q_2} \right) e^{-i[aq_1 + b(q_1 + q_2)]} \right] B.$$

Sendo A amplitude incidente, B amplitude de reflexão e E amplitude de transmissão e sendo q_1 e q_2 os números de onda. Podemos relacionar essas amplitudes em uma situação bem simples, fazendo $A = 1$, $B = r$, $E = t$, $F = 0$, seguindo o que foi feito na seção (2.7), portanto obter as seguintes relações

$$r = \left[\frac{(\cos aq_1 + i \sin aq_1)(iq_1q_2(\rho\sigma - \varrho\mu) \cos bq_2 + (q_1^2\varrho\rho - q_2^2\sigma\mu) \sin(bq_2))}{iq_1q_2(\rho\sigma + \varrho\mu) \cos bq_2 + (q_1^2\varrho\rho + q_2^2\sigma\mu) \sin(bq_2)} \right], \quad (4.61)$$

e

$$t = \frac{2ie^{-ibq_1} q_1 q_2 \varrho \rho \sigma \mu}{iq_1 q_2 (\rho \sigma + \varrho \mu) \cos bq_2 + (q_1^2 \varrho \rho + q_2^2 \sigma \mu) \operatorname{sen} bq_2} , \quad (4.62)$$

De forma que podemos definir o coeficiente de Reflexão R e Transmissão T como

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|E|^2}{|A|^2} \quad (4.63)$$

Então o fluxo de Reflexão e Transmissão será dado por, $R = |r|^2$ e $T = |t|^2$, portanto

$$R = \frac{q_1^2 q_2^2 (\rho \sigma - \varrho \mu)^2 \cos^2(bq_2) + (q_1^2 \varrho \rho - q_2^2 \sigma \mu)^2 \sin^2(bq_2)}{q_1^2 q_2^2 (\rho \sigma + \varrho \mu)^2 \cos^2(bq_2) + (q_1^2 \varrho \rho + q_2^2 \sigma \mu)^2 \sin^2(bq_2)} , \quad (4.64)$$

e

$$T = \frac{4q_1^2 q_2^2 \varrho^2 \rho^2 \sigma^2 \mu^2}{q_1^2 q_2^2 (\rho \sigma + \varrho \mu)^2 \cos^2 bq_2 + (q_1^2 \varrho \rho + q_2^2 \sigma \mu)^2 \operatorname{sen}^2 bq_2} , \quad (4.65)$$

Lembrando como esse modelo depende de parâmetros, temos então $2\alpha + \beta = -1$. Thomsen [59] afirma que é conveniente tomar os valores $\alpha = 0$ e $\beta = -1$ e Levy-Leblond [60] mostra que essa escolha é compatível com a invariância Galileana. Tomando esses valores para nosso problema, recuperamos o valor encontrado em (4.43). Uma verificação importante é que estes coeficientes devem obedecer a conservação de partículas, cada partícula incidente deve ser ou refletida ou transmitida, substituindo as constantes (4.43) nas equações (4.64) e (4.65) de modo que iremos encontrar a seguinte relação,

$$R(E) + T(E) = 1 \quad (4.66)$$

4.5.1 Análise Gráfica

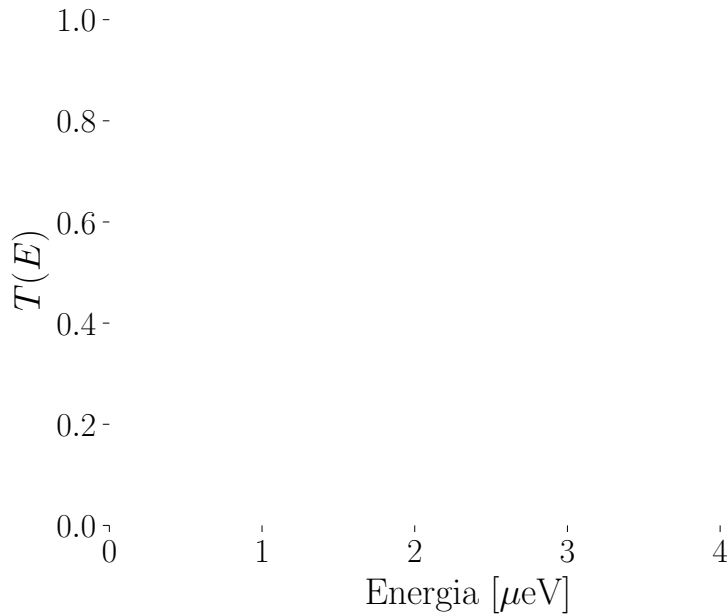
Nesta seção vamos analisar o comportamento gráfico da transmissão em função da energia, e tomando a massa efetiva dos materiais como sendo $m_1 = c_1 m_e$ e $m_2 = c_2 m_e$, onde c_1 e c_2 são

constantes, e m_e é a massa do elétron, de forma que teremos a seguinte equação

$$T(E) = \frac{1}{\cos^2\left(\sqrt{\frac{b^2 2m_2 E}{\hbar^2}}\right) + \frac{(c_1^3 + c_2^3)^2}{4c_1^3 c_2^3} \sin^2\left(\sqrt{\frac{b^2 2m_2 E}{\hbar}}\right)} \quad (4.67)$$

Utilizando os mesmos parâmetros usados por Lima [1], ou seja, para uma heteroestrutura formada pela alternância de Ga e Pb, onde a massa efetiva desses materiais são $m_1 = 0,58m_e$ e $m_2 = 1,97m_e$, respectivamente. Escolhendo $b = 0,5 \cdot 10^{-6}$ m, $m_e = 9,10938 \cdot 10^{-31}$ kg, $\hbar = 6,58212 \cdot 10^{-16}$ eV·s, sendo $1\text{eV} = 1,60217733 \cdot 10^{-19}$ J, obtemos o gráfico da Fig.(4.7)

Figura 4.7. Gráfico do coeficiente de transmissão da equação (4.67) em função da energia.



Fonte: Autor, 2016.

O gráfico mostra claramente que $T(E)$ é uma função oscilante de E quando $m_1 \neq m_2$ e que o mesmo apresenta ressonância ($T(E) = 1$), a equação (4.67) mostra que o coeficiente de transmissão T é em geral menor do que 1, que como foi citado antes difere do resultado clássico em que $T = 1$ para esse caso. Mas na mecânica quântica podemos perceber que o resultado é diferente, a partícula mesmo tendo energia maior do que o potencial da barreira pode ser refletida. A ressonância, ou estados ressonantes, ocorre quando $\sin^2\left(\sqrt{\frac{b^2 2m_2 E}{\hbar}}\right) = 0$ de forma que os máximos

e os mínimos é dado por, em eV

$$E_{max}(n) = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{8b^2 c_2 m_2}, \quad \text{com } n = 1, 2, \dots \quad (4.68)$$

e

$$E_{min}(n) = \frac{(2n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8b^2 c_2 m_2}, \quad \text{com } n = 1, 2, \dots \quad (4.69)$$

em que n é um número inteiro positivo, assim a partícula é transmitida com probabilidade máxima. Este efeito de tunelamento não possui nenhum analago clássico.

4.6 Transmissão no Novo Modelo

Nesta seção iremos calcular a transmissão dado pelo novo modelo proposto por [1], lembrando que todas as condições de contorno já foram calculadas nas seções anteriores a única diferença é que este modelo não tem dependência nos parâmetros α, β, γ . Então a única mudança na equação da transmissão, dado pela Eq.(4.65), será substituir as constantes $\mu, \rho, \varrho, \sigma$ por ω, θ, ξ, ν e seus valores dado por (4.54) e (4.55), portanto temos a seguinte equação para a Transmissão T_{nv}

$$T_{nv} = \frac{4q_1^2 q_2^2 \xi^2 \theta^2 \nu^2 \omega^2}{q_1^2 q_2^2 (\theta \nu + \xi \omega)^2 \cos^2 b q_2 + (q_1^2 \xi \theta + q_2^2 \nu \omega)^2 \sin^2 (b q_2)}, \quad (4.70)$$

e para a Reflexão

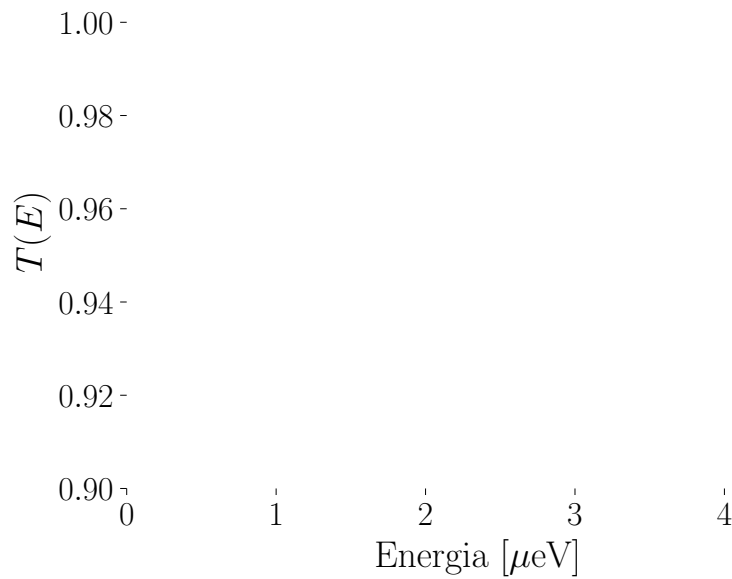
$$R_{nv} = \frac{q_1^2 q_2^2 (\theta \nu - \xi \omega)^2 \cos^2 (b q_2) + (q_1^2 \xi \theta - q_2^2 \nu \omega)^2 \sin^2 (b q_2)^2}{q_1^2 q_2^2 (\theta \nu + \xi \omega)^2 \cos^2 (b q_2) + (q_1^2 \xi \theta + q_2^2 \nu \omega)^2 \sin^2 (b q_2)^2}, \quad (4.71)$$

Verificando a conservação de energia para este modelo, substituindo as constantes por (4.54) e (4.55), iremos obter novamente a relação $R(E) + T(E) = 1$, já discutido na seção (2.7). Fazendo as devidas simplificações em (4.70), a T_{nv} em termos de energia é dado por

$$T_{nv} = \frac{1}{\cos^2 \left(b \frac{\sqrt{2c_2 m_e E}}{\hbar} \right) + \left(\frac{(c_1+c_2)^2 (4c_1^2+13c_1c_2+c_2^2)^2 (c_1^2+13c_1c_2+4c_2^2)^2}{4c_1c_2(2c_1+c_2)^2(5c_1+c_2)^2(c_1+2c_2)^2(c_1+5c_2)^2} \right) \sin^2 \left(b \frac{\sqrt{2c_2 m_e E}}{\hbar} \right)} \quad (4.72)$$

O gráfico , Fig.(4.8), será usando os mesmos dados para a heteroestrutura de Ga e Pb, assim como todas as constantes físicas dada em seções anteriores.

Figura 4.8. Gráfico da transmissão para o modelo proposto por Lima

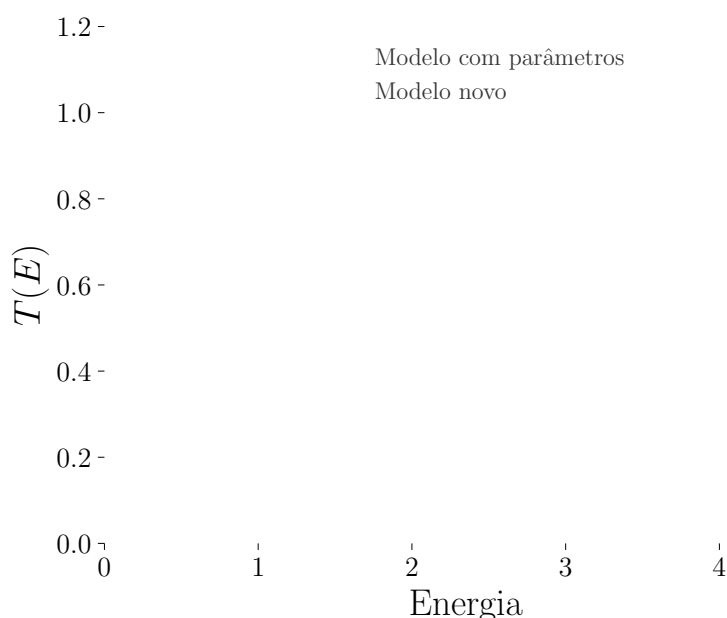


Fonte: Autor, 2016.

Mais uma vez temos uma solução oscilante para $m_1 \neq m_2$, a diferença entre (4.7) e a Transmissão do novo modelo se dá pelas constantes que multiplicam o termo seno. Teremos novamente estados ressonantes quando $T(E) = 1$, para uma melhor análise sobreposos os gráficos da Fig.(4.7) e Fig.(4.8) de forma que temos a figura (4.9)

Como a estrutura estudada é a mesma para saltos na massa a potencial $V_0 = 0$ podemos perceber que os estados ressonantes são iguais, portanto teremos os mesmos máximos de energia, dada pela por Eq. (4.68).

Para o caso particular em que $m_1 = m_2$, teremos $q_1 = q_2$, substituindo na Eq.(4.65), teremos $T(E) = 1$ e conseqüentemente, pela Eq. (4.64), $R(E) = 0$, ou seja, classicamente a onda é totalmente transmitida como foi explicado para o caso que temos energia maiores que o potencial, a partícula clássica passaria pela estrutura de massa efetiva a $V_0 = 0$ com certa energia cinética, quando estivesse na região da interface dos dois materiais a partícula iria perder energia cinética, mas iria recuperar sua velocidade inicial depois de atravessá-la. Mas vimos que a Física Quântica

Figura 4.9. Gráfico das transmissões sobrepostos.

Fonte: Autor, 2016.

nos leva a resultados diferentes dos previstos classicamente.

A Fig. (4.9) representa os gráficos gerados pelas equações (4.67) e (4.72), verificamos que possuem solução oscilatórias e que possuem os mesmos máximos de energia para estados ressonantes quando temos $T(E) = 1$, porém, os mínimos de energia são diferentes visto que o novo modelo não usa parâmetro nenhum.

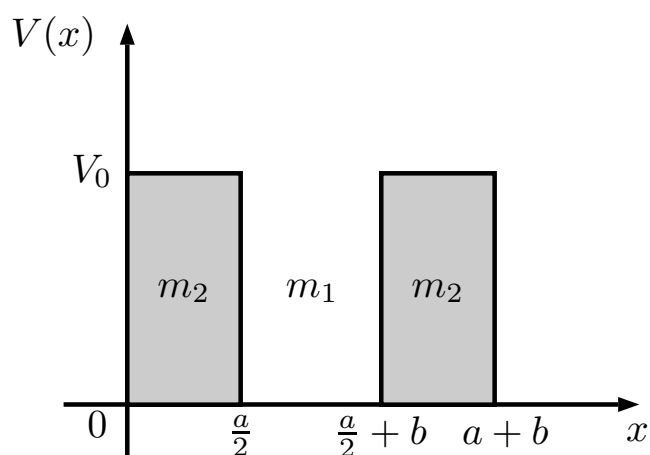
4.6.1 Transmissão na Estrutura com Potencial Do Novo Modelo

Nas seções anteriores fizemos uma análise na transmissão para uma partícula livre com massa dependente da posição. Agora vamos analisar a mesma estrutura colocando um potencial constante, onde $V_0 \geq 0$. Para estudar as propriedades ondulatórias associadas a propagação de uma partícula quântica de massa $m(x)$ e energia E que se movimenta unidimensionalmente e incide sobre um potencial $V(x)$ devemos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo (4.16). Para este problema de tunelamento no qual os coeficientes A e B estão associados com a incidência e reflexão dos pacotes de onda do lado esquerdo da barreira, enquanto, E é o coeficiente de trans-

missão do pacote no lado direito da barreira. Para pacotes de onda incidindo com energias maiores que a barreira $E > V_0$ Fig.(4.10), uma vez definida a forma do potencial $V(x)$ é possível obter a solução geral para a função de onda $\psi(x)$ e dela identificar suas componentes associadas à incidência (Ae^{ikx}), reflexão (Be^{-ikx}) e transmissão (Fe^{ikx}) da partícula neste potencial.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x < \frac{a}{2}, \\ 0 & \frac{a}{2} \leq x < \frac{a}{2} + b, \\ V_0 & \frac{a}{2} + b \leq x \leq a + b \end{cases} \quad (4.73)$$

Figura 4.10. Barreira a potencial constante



Fonte: Autor, 2016.

A solução da equação de Schrödinger na barreira são exponenciais complexas em todas as regiões espaciais. Os coeficientes são obtidos impondo a continuidade da função de onda e de sua derivada nas interfaces dado por (4.57) e (4.58). Com isso pode-se conectar os coeficientes da barreira da esquerda, com os da direita, e usando as condições imposta por (4.54) e (4.55), e usando agora

$$q_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}} \quad (4.74)$$

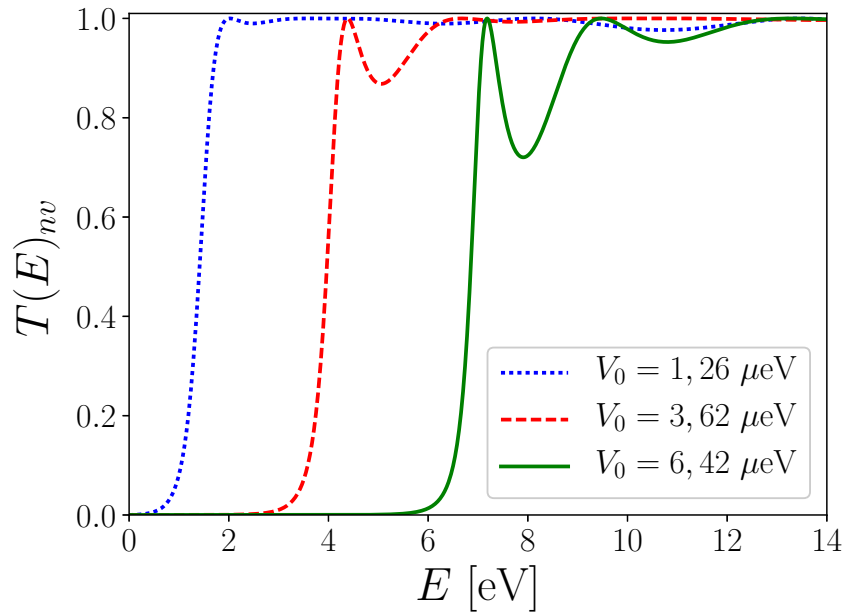
$$q_2 = \sqrt{\frac{2m_2 (E - V_0)}{\hbar^2}}$$

onde q_1 e q_2 são os números de onda que definem a magnitude do momento em cada região, da qual segue imediatamente o coeficiente de transmissão $T(E)_{nv}$ para o novo modelo já com as simplificações dado por,

$$T(E)_{nv} = \frac{1}{\cos^2(bq_2) + \frac{1}{4} \left(2 + \frac{c_1(2c_1+c_2)^2(c_1+5c_2)^2 E}{c_2(5c_1+c_2)^2(c_1+2c_2)^2(E-V_0)} + \frac{c_2(5c_1+c_2)^2(c_1+2c_2)^2(E-V_0)}{c_1(2c_1+c_2)^2(c_1+5c_2)^2 E} \right) \sin^2(bq_2)} \quad (4.75)$$

A Fig. (4.11) representa a Transmissão da Eq. (4.75) com valores de potenciais diferentes, com comprimento da barreira da do por $b = 0,5 \times \mu m$, mais uma vez para energias acima da barreira teremos um comportamento oscilatório em função da energia, os demais valores já calculados temos o gráfico mostrado na figura abaixo

Figura 4.11. Gráfico da transmissão para potenciais diferentes e com o mesmo comprimento de barreira $b = 0,5 \times \mu m$.

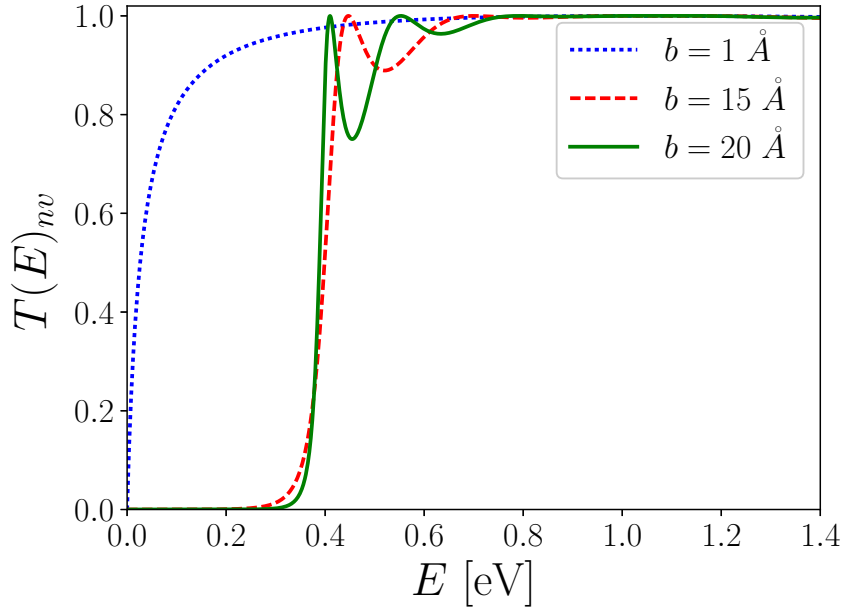


Fonte: Autor, 2016.

Assim como foi feito no capítulo 2, calculamos o probabilidade de transmissão com um potencial fixo com valor de $V = 0,362eV$, a figura (4.12) representa valores da transmissão para diferentes comprimentos da barreira.

Sendo $V(x)$ um potencial real, então reflexão e transmissão são as únicas possibilidades para a

Figura 4.12. Gráfico da transmissão para valores de comprimento de barreira diferentes, para um mesmo potencial.



Fonte: Autor, 2016.

partícula que incide nele, de modo que devemos ter $R(E) + T(E) = 1$, ao atingir $V(x)$, o fluxo de probabilidade incidente se desdobra em um fluxo refletido e outro transmitido e, portanto, esta equação traduz a conservação do fluxo de probabilidade. Da mesma forma que achamos para o caso para potencial $V(x) = 0$ já verificado anteriormente. A probabilidade de transmissão Fig.(4.11) para energias maiores que o potencial $E > V_0$ a transmissão é oscilatória, se fizermos $V_0 = 0$ para todo o problema de massa dependente da posição iremos retornar ao resultado obtido na Eq. (4.72). Pela Fig.(4.11) temos os estados ressonantes de $T(E)_{nv}$, estes valores característicos E_n dos máximos de $T(E)$ podem ser determinados através da condição

$$bq_2 = n\pi, \quad \text{com} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.76)$$

do ponto de vista de energia, a condição acima equivale a ter

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2b^2 m_2} + V_0, \quad \text{com} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.77)$$

Os picos mais estreitos de $T(E)_{nv}$, observados para as energias mais baixas, são denominados de ressonâncias de transmissão e as energias E_n que definem as suas posições são justamente aquelas correspondentes aos estados ligados de um poço infinito.

Por fim, uma observação a ser feita é que, ao contrário das seções anteriores, não desenvolvemos também nesta seção um estudo da probabilidade de reflexão no potencial $V(x) = 0$ para os dois modelos e $V(x) > 0$, tendo em vista que ele não seria necessário. A condição da conservação da probabilidade de encontrar a partícula, traduzida pela Eq. (4.66), permite obter imediatamente $R(E)$ a partir do conhecimento da probabilidade de transmissão $T(E)$. Dessa forma, como $R(E) = 1 - T(E)$, então todas as características relacionadas com o estudo analítico/gráfico de $T(E)$ podem ser direcionadas ao seu complemento à unidade e assim aplicadas para $R(E)$.

Capítulo 5

CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Neste trabalho o ponto central foi estudar dois tipos de Hamiltoniano propostos na literatura considerando soluções estacionárias para esses tipo de sistemas. Lembrando que o Hamiltoniano (4.12) não é o único e existe diferentes escolhas para os parâmetros α , β e γ . Aqui tratamos uma partícula livre com saltos na massa numa estrutura periódica, mas diferentes escolhas dos parâmetros pode tratar problemas diferentes.

O Hamiltoniano cinético dado por (4.45) tem uma vasta aplicabilidade, é menos flexível que (4.12), pois não existe parâmetros pra escolher. E não existe escolha nos parâmetros que recupera o Hamiltoniano do novo modelo, logo o novo modelo não é um caso particular do outro, eles não são compatíveis. Como uma aplicação, o autor [1] encontrou as minibandas de energia para a primeira zona de Brillouin para uma heteroestrutura formada por dois materiais diferentes, utilizando dois hamiltonianos aqui estudado e os resultados que se obtem mostra que esses modelos são equivalentes para $V_0 = 0$.

Ao longo do trabalho foram discutidos vários temas importantes. No capítulo 2 fizemos um breve revisão da mecânica quântica, e como aplicação dessas teorias fizemos dois exemplos clássicos na MQ, uma do poço infinito e um sobre tunelamento em barreira. No capítulo 3 estudamos o com-

portamento dos elétrons dentro de um metal, isolante e semicondutor, para que pudéssemos chegar a teoria de massa efetiva e seu entendimento.

No capítulo 4 estudamos a transmissão, consideramos um potencial constante $V_0 = 0$, resolveu-se analiticamente a equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo propusemos uma solução de ondas planas para uma heteroestrutura com massa dependente da posição utilizando as hamiltonianas (4.12) e (4.45) e suas condições de contorno dada pela descontinuidade da massa na interface da estrutura, e como consequência foi obtida uma expressão analítica para o coeficiente de transmissão dada pelas equações (4.67) e (4.72) e plotamos as figuras representadas em (4.7) e (4.8). Apesar de serem modelos diferentes eles são equivalentes, possuem estados ressonantes iguais como pode-se observar pela equação (4.68).

Por fim, usando a mesma estrutura, nós aplicamos um potencial constante $V_0 > 0$ de acordo com a condição (4.73) para a hamiltoniano do novo modelo (4.45), tratando o problema como um sistema de barreira, verificamos que o resultado obtido está de acordo a literatura [58] e [62]. Usamos este potencial para estudar o comportamento de uma partícula quântica e obtivemos as suas probabilidades de reflexão $R(E)$ e transmissão $T(E)$. Encontramos uma expressão para a transmissão dado pela equação (4.75) e plotamos o gráfico da Fig.(4.11) para valores diferentes de potencial, e a Fig. (4.12) representa o valor da transmissão para valores diferentes de comprimento da barreira. Podemos comparar esses gráficos obtidos com os calculados no capítulo 2, ou seja, para valores diferentes de potenciais a transmissão no novo modelo dada pela Fig. (4.11) equivalente a Fig. (2.4), e para valores diferentes de comprimento da barreira a figura do novo modelo dado por (4.12) equivalente a Fig.(2.3). Este fenômeno de ressonância de transmissão pode ser observado no espalhamento de elétrons de baixa energia por átomos de gases nobres (Ar, Ne), na física atômica e em física nuclear, no espalhamento de nêutrons com energias de uns poucos MeV por núcleos. No caso da física atômica o fenômeno recebe o nome de efeito Ramsauer-Townsend [61] enquanto que na física nuclear ele é conhecido como ressonâncias de tamanho ou estados de partícula única, com isso esses sistemas ressonantes apresentam mais possibilidade de aplicações. Tanto para a barreira como para o poço de potencial e a heteroestrutura com $V_0 = 0$ com saltos na massa, este

comportamento da transmissão pode ser visto como uma manifestação da natureza ondulatória do sistema. Esses resultados apesar de serem usados para dois metais, podem ser feitos para materiais semicondutores substituindo o Pb por As e montando estruturas alternadas entre semicondutores, Assim como [63] que para os sistemas de barreiras simples e dupla o efeito túnel se manifesta claramente.

Como objetivos futuros, tentar criar um potencial dependente da posição, assim como a massa (4.22), e verificar se a equação possui o mesmo comportamento se fizermos $V_0 \geq 0$ e recuperar os resultados obtidos anteriormente. Usar o mesmo potencial dependente da posição para a hamiltoniana (4.12) e obter os mesmos resultados encontrado na literatura. Modificar os materiais afim de obter uma estrutura totalmente semicondutora com massa dependente de posição e verificar como é o comportamento do coeficiente de transmissão variando a posição do potencial. Mudar o tipo de estrutura afim de podermos realizar um experimento e verificar quais dos modelos propostos é o mais adequado.

Apêndice A

Espaço de Hilbert

Definição A.1.1. Definição Seja V um espaço vetorial complexo

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C} \quad (\text{A.1})$$

é chamada de um produto interno em V para todo $x, y, z \in V$ e $\alpha \in \mathbb{C}$, as seguintes condições forem satisfeitas:

- (a) $\langle a, b \rangle = \overline{\langle b, a \rangle}$
- (b) $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$
- (c) $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle \forall \alpha \in \mathbb{C}$
- (d) $\langle x, x \rangle = 0$ se, e somente se, $x = 0$
- (e) $\langle x, x \rangle \geq 0 \forall x \in H$

O par $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ é chamado de um espaço produto interno. Todo produto interno induz uma norma dada por

$$\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle} \quad (\text{A.2})$$

O par $(V, \|\cdot\|)$, onde $\|\cdot\|$ é a norma induzida, é chamado de espaço normado. Segue da propriedade

(a) que

$$\langle x, \alpha y \rangle = \overline{\langle \alpha y, x \rangle} = \overline{\alpha \langle y, x \rangle} = \overline{\alpha} \overline{\langle y, x \rangle} = \overline{\alpha} \langle x, y \rangle \quad (\text{A.3})$$

Definição A.1.2 Seja V um espaço vetorial com produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, cuja norma é induzida pelo produto interno. Se diz V é um espaço de Hilbert se ele é completo nessa norma.

Definição A.1.3. Um espaço de Hilbert é chamado de separável se ele possui um subconjunto enumerável denso.

Referências Bibliográficas

- [1] LIMA, Jonas R. F.; VIEIRA, M.; FURTADO, C.; MORAES, F. e FILGUIRAS, Cleverson. Yet another position-dependent mass quantum model. *Journal of Mathematical Physics*, 53, p. 072101, 2012.
- [2] H, Fowler; L. Nordheim. Electron Emission in Intense Electric Fields. *Proc. Roy. Soc. (London) A119*. v. **119**, p.173-181, 1928.
- [3] C. ZENER. A theory of electrical breakdown voltages of solid dielectrics. *Proc. Roy. Soc. (London) A145* v. **145**, p.523-529, 1934.
- [4] L. ESAKI. New Phenomenon in Narrow Germanium $p-n$. *Phys. Rev.* v. **109**, p.603-604, 1958.
- [5] WANNIER, G. H. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals. *Phys. Rev.*,v. **52**, p.191-197, 1937.
- [6] SLATER, J. C. Electrons in perturbed periodic lattices. *Phys. Rev.*, v. **76**, p.1592-1601, 1949.
- [7] JAMES, H. M. Eletronic states in perturbed periodic system. *Phys. Rev.*, v. **76**, p. 1611-1624, 1949.
- [8] LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Phys. Rev.*,v. **97**, p. 869-883, 1955.
- [9] KITTEL, C; MITCHELL, A. H. Theory of donor and acceptor states in silicon and germanium. *Phys. Rev.*, v. **96**, p. 1488-1493, 1954.

- [10] KOHN, W.; LUTTINGER, J. M. Theory of donor states in silicon. *Phys. Rev.*, v. **98**, p. 915-922, 1955.
- [11] SERRA, L.; LIPPARINI, E. Spin response of unpolarized quantum dots. *Europhysics Letters*, v. **40**, p. 667-672, 1997.
- [12] ARIAS DE SAAVEDRA, F.; BORONAT, J.; POLLS, A.; FABBROCINI, A. Effective mass of one ^4He atom in liquid ^3He . *Physics Review B*. v. **50**, p. 4248-4251, 1994.
- [13] STERN, F.; DAS SARMA, S. Electron energy levels in $\text{GaAs} - \text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ heterojunctions. *Phys. Rev. B*, v. **30**, p. 840-848, 1984.
- [14] LASSNIG, R. k-p theory, effective-mass approach, and spin splitting for two dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, v. **31**, p. 8076-8086, 1985.
- [15] BASTARD, G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, v. **24**, p. 5693-5697, 1981.
- [16] KAHEN, K. B.; LEBURTON, J. P. Optical constants of $\text{GaAs} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ superlattices and multiple quantum wells. *Phys. Rev. B*, v. **33**, p. 5465-5472, 1986.
- [17] R. TSU.; L. ESAKI. Tunneling in a finite superlattice. *Phys. Letters.*, v. **22**, p. 562-564, 1973.
- [18] L. L. CHANG.; ESAKI, L; R. TSU. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. *Phys. Letters*. v. **24**, p. 593-595, 1974.
- [19] VON ROOS, Oldwig. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. *Physical Review B*, v. **27**, n. 12, p. 7547-7552, 1983.
- [20] B. K. PAL.; B. Roy.; B. BASU. Quantum dot with spin-orbit interaction in noncommutative phase space and analog Landau levels. *Phys. Letters A*. v. **374**, p. 4369-4374, 2010.
- [21] V. V. KUDRYASHOV. Nonlinear phenomena in complex system. v. **12**, p. 199-203, 2009.

- [22] A. D. ALHAIDARI. Nonrelativistic Green's function for system with position dependent mass. *J. Theor. Phys.* v. **42**, p. 2999-3009, 2003.
- [23] M. S. CUNHA.; H. R. CHRISTIANSEN. Analytic results in the position-dependent mass schroedinger problem. *Communications in Theoretical Physics.* v. **60**, p. 642, 2013.
- [24] C. QUESNE.; B. BAGCHI. Hamiltonians with position-dependent mass derformations and supersymmetry. *Bulg. J. Phys.* v. **33**, p. 308-318, 2006.
- [25] CRUZ, S.; ORTIZ, O. R. Position-dependent mass oscillators and coherent states. *Journal of Physics A.* v. **42**, p. 185-205, 2009.
- [26] MUSTAFA, O; MAZHARIMOUSAVI, H. S. Ordering ambiguity revisited via position dependent mass pseudo-momentum operators. *International Journal of Theoretical Physics.* v. **46**, p. 1786-1796, 2007.
- [27] MUSTAFA, O.; MAZHARIMOUSAVI, H. S. Complexified Von Roos hamiltonians η -weak-pseudo-hermiticity, isospectrality and exact solvability. *Journal of Physics A.* v. **41**, p. 244020, 2008.
- [28] J. YU.; S. H. DONG. *Phys. Lett. A.* v. **325**, p. 194-198, 2004.
- [29] PLANCK, M. On the law of distribution of energy in the normal spectrum. *Ann. Phys.* v. **4**, p. 1-11, 1901.
- [30] EINSTEIN, A. The Photoelectric Effect. *Ann. phys.* v. **322**, N. 6, p. 132-148, 1905.
- [31] DAVISSON, C.; GERMER, L. H. Diffraction of electrons by a crystal of nickel. *Physical Review.* v. **30**, n. 6, p. 705-740, 1927.
- [32] G. BINNIG.; H. ROHRER. Scanning tunneling microscopy. *Helvetica Physica Acta.* v. **55**, p. 726, 1982.
- [33] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Lalo , *Quantum Mechanics* (Wiley, New York 1977)

- [34] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, New York 1994)
- [35] S. M. REZENDE. Materiais e Dispositivos Eletrônicos. *Editora Livraria da Física*. Cap. 4, p. 99, 2004.
- [36] DRUDE, P. Zur Elektronentheori der Metalle, I. Teil. *Annalen der Physik*. v. **306**, N. 3, p. 566-613, 1900.
- [37] DRUDE, P. Zur Elektronentheori der Metalle, II. Teil. *Annalen der Physik*. v. **308**, N. 11, p. 369-402, 1900.
- [38] SOMMERFELD, A. Zur Elektronentheori der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik. *Zeitschrift fur Physik*. v. **47**, N. 1-2, p. 1-32, 1928.
- [39] KITTEL, C. Introduction to solid State Physics. *John Wiley & Sons*, 1976.
- [40] BLOCH, F. Uber die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeit. Phys.* v. **52**, N. 7-8, p. 555-600, 1929.
- [41] ASHCROFT, N.W e MERMIN, N.D. Solid State Physics. Philadelphia. Saunders, 1976.
- [42] KRONIG, R. L.; PENNEY, W. G. Quantum Mechanics of Electrons in Cristal Lattices. *Proc. Roy. Soc. A*. v. **130**, p. 499-513, 1931.
- [43] WILSON, A. H. The Theory of Electronic semi-conductors. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*. v. **133**, p. 458-491, 1931.
- [44] HARRISON, P. *Quantum Wells, Wires and Dots*. 2nd. ed. The University of Leeds, UK. Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures. John Wiley & Sons, 2005.
- [45] SEVER R.; TEZCAN, C. Exact Solution of Schroedinger equation for Modified Kratzer's molecular potential with the position-dependent. *International Journal of Modern Physics E*. v. **17**, 2008.

- [46] A. D. ALHAIDARI. Solution of the relativistic Dirac-Morse problem. *Physical Review Letters*. v. **87**, p. 210405, 2001.
- [47] R. KOC.; M. KOCA.; G. SAHINOGLU. *Eur. Phys. J. B*. v. **48**, p. 583, 2005.
- [48] de SOUZA DUTRA, A.; ALMEIDA, C. A. S. Exact solvability of potentials with spatially dependent effective mass. *Physics Letters A*. v. **275**, p. 25-30, 2000.
- [49] RENAN, R.; PACHECO, M. H.; ALMEIDA, C. A. S. Treating some solid state problems with the Dirac equation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. **33**, p. 509-514, 2000.
- [50] BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. Space-Charge effects on electron tunneling. *Physical Review*, v. **152**, p. 683-692, 1966.
- [51] GORA, T.; WILLIAMS, F. Theory of electronic states and transport in graded mixed semiconductors. *Phys. Rev.* v. **177**, p. 1179-1182, 1969.
- [52] ZHU, Q.-G.; KROEMER, H. Interface connection rules for effective-mass wave function at an abrupt heterojunction between two different semiconductors. *Phys. Rev. B*, v. **27**, p. 3519-3527, 1983.
- [53] CAVALCANTE, F. S. A.; COSTA FILHO, R. N.; FILHO, J. R.; DE ALMEIDA, C. A. S.; FREIRE, V. N. Form of the quantum kinetic-energy operator with spatially varying effective mass. *Phys. Rev. B*, v. **55**, p. 1326-1328, 1997.
- [54] MORROW, R. A.; BROWNSTEIN, K. R. Model effective-mass hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions. *Phys. Rev. B*, v. **30**, p. 678-680, 1984.
- [55] MUSTAFA, O.; MAZHARIMOUSAVI, S. H. A quasi-free position dependent mass jump and self-scattering correspondece. *Physica Scripta*, Stockholm, v. **82**, n. 6, p. 065013, 2010.

- [56] LI, T. L.; KUHN, K. J. Band-offset ratio dependence on the effective-mass hamiltonian based on a modified profile of the GaAs- Al_xGa_{1-x} As quantum well. *Phys. Rev. B*, v. **47**, p. 12760-12770, 1993.
- [57] BREZINA. *Solid State Comm.* v. **86**, N. 9, 1993.
- [58] LEVY-LEBLOND, J. M. Elementary quantum models with position-dependent mass. *European Journal of Physics*, Bristol, v. **13**, n. 5, p. 215, 1992.
- [59] THOMSEN, J.; EINEVOLL, G. E. HEMMER, P. Operator ordering in effective-mass theory. *Physical Review B*, v. **39**, p. 12783-12788, 1989.
- [60] LEVY-LEBLOND, J. Position-dependent effective-mass and galilean invariance. *Physical Review A*, v. **52**, p. 1845-1849, 1995.
- [61] C.W. Ramsauer, *Ann. Phys.* 64, 513 (1921). *C.W. Ramsauer, Ann. Phys.* 64, 513 (1921).
- [62] M. A. Candido Ribeiro; V.C. Franzoni; W.R. Passos; E.C. Silva; A.N.F. Aleixo. Quantum scattering in elementary potential problems *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v.26, p.1-10, 2004.
- [63] David K. Ferry and S. M. Goodnick. *Transport in Nanostructures. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering*, Cambridge University Press, 2000.