



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
Campus de São José do Rio Preto

Karina Heloisa Paulino

Poços Quânticos e Transferência de Elétrons

São José do Rio Preto

-2009-

Karina Heloisa Paulino

Poços Quânticos e Transferência de Elétrons

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, área de concentração Biofísica Molecular, junto ao programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

Co-orientadora: Prof. Dra. Regina Maria Ricotta

São José do Rio Preto

-2009-

KARINA HELOISA PAULINO

Poços Quânticos e Transferência de Elétrons

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, área de concentração Biofísica Molecular, junto ao programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Departamento de Física do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, Brasil.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Elso Drigo Filho
Livre-Docente
UNESP – São José do Rio Preto
Orientador

Prof. Dr. Antônio Vidiella Barranco
Livre-Docente
Universidade Estadual de Campinas

Prof. Dr. Jorge Chaine
Livre-Docente
UNESP – São José do Rio Preto

São José do Rio Preto, 17 de dezembro de 2009.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por sempre estar ao meu lado e por ser o auxílio, força e proteção que sempre precisei em minha vida.

Agradeço aos meus pais, Neide e Olizio, por cuidarem de mim com muito amor e carinho em todos os momentos da minha vida e sem medir esforços, me proporcionaram uma boa educação que servirá de alicerce para o resto da minha vida.

A minha irmã Keila que sempre me apoiou em todas as minhas decisões, sempre me encorajando e sendo o meu suporte nas horas de fraqueza.

Ao meu noivo Renato que com muito amor, carinho e paciência, soube entender todas as minhas escolhas e sempre esteve ao meu lado para que eu pudesse subir mais um degrau em minha vida.

Ao meu orientador Prof. Dr. Elso Drigo Filho, que sempre me ensinou, me capacitou e me preparou não somente na Física, mas principalmente na vida, com seus risos e seus exemplos.

Agradeço a minha co-orientadora Prof. Dra. Regina Maria Ricotta que me ajudou com seus conhecimentos, sempre com muita dedicação e amizade.

A todos os professores que contribuíram para a minha formação, me capacitando com seus ensinamentos. Agradeço em especial ao Prof. Dr. Vitor Leite e ao Prof. Dr. João Ruggiero pelas opiniões e sugestões dadas na minha qualificação.

A todos os meus amigos da equipe de estudos em Mecânica Quântica, em especial a Gisele, Marcelo e ao Fabrício por me apoiarem na conclusão deste trabalho.

Agradeço as minhas eternas “amigas” Natalia Favaro Ribeiro, Franciele Polotto, Gisele Baldissera pelo incentivo, apoio e carinho sincero criado nesses seis anos de amizade. Em especial a minha amiga Rita de Cássia dos Anjos que mesmo longe, sempre esteve me apoiando nas realizações dos meus sonhos.

A todos os meus amados amigos e amigas de Monte Aprazível, pelas orações, incentivo e amizade verdadeira que sempre tivemos e principalmente ao meu primo Fernando Henrique Paulino por me acompanhar até São Paulo.

Ao Ibilce/UNESP por me dar a oportunidade de estudar, pesquisar e crescer pessoal e profissionalmente.

A CAPES pelo importante apoio financeiro.

“Tudo posso naquele que me fortalece”

Fl 4,13

RESUMO

Neste trabalho foram resolvidos, através de Equação de Schrödinger independente do tempo, os potenciais biestáveis do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico (PDQUS) e do Poço Duplo Assimétrico (PDQUA), concentrando neste último grande parte do estudo.

Como todo PDQUS é ressonante por definição, é possível então estimar o tempo de tunelamento através da Fórmula de Rabi. O mesmo não acontece com PDQUA, pois nem todo poço duplo assimétrico é ressonante. Foi necessário então, encontrar barreiras de potencial e distância entre os poços que permitiram a ressonância, pois a probabilidade de tunelamento é muito maior que aquelas dos casos onde não há ressonância.

Além do tempo de tunelamento, o tempo de transição eletrônica também é estimado, com o objetivo de propor um modelo de transferência eletrônica (TE). Uma possível aplicação para tal modelo está relacionada a sistemas biológicos ocorrendo por tunelamento e por transição, utilizando o PDQUA.

Com base na TE em bactérias fotossintéticas, pôde-se obter informações estruturais, como: as distâncias e energias envolvidas no processo, que foram essenciais para os exemplos numéricos tratados nesse trabalho.

PALAVRAS-CHAVE: Poço Duplo Quadrado Unidimensional Assimétrico, Tunelamento, Transferência Eletrônica.

ABSTRACT

In this work were resolved, by Schrödinger equation independent of time, the bistable potential of the One Dimensional Symmetric Double Square Well (PDQUS) and Asymmetric Double Well (PDQUA), concentrating largely in the latter study.

As all PDQUS is resonant by definition, it is possible then estimate the time of tunneling through the Rabi formula. This not happens with PDQUA, because not all asymmetric double well is resonant. It was necessary then, to find potential barriers and distance between wells that allowed the resonance because the tunneling probability is much higher than those cases where there is no resonance.

Besides the time of tunneling, the electronic transition time is also estimated, with the objective of proposing a model of electron transfer (TE). One possible application for such a model is related to biological systems occurring by tunneling and transition, using the PDQUA.

Based on the TE in photosynthetic bacteria, could be obtained structural information, such as distances and energies involved in the process, which were essential for the numerical examples treated in this work.

KEYWORDS: One Dimensional Asymmetric Double Square Well, tunneling, electronic transition.

LISTA DE FIGURAS

2.1 Representação do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico.	4
2.2 Gráfico da variação das energias E_+ e E_- em relação e diferença de energia Δ	15
3.1 Representação do $V(x)$ no Poço Duplo Quadrado Unidimensional Assimétrico	20
4.1 Diagrama do modelo proposto para transferência de elétrons.	31
5.1 Poço Duplo Quadrado Unidimensional Assimétrico com a identificação dos parâmetros utilizados.	33
5.2 Reação de Transferência Eletrônica	36
5.3 Função de onda para o primeiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x).	41
5.4 Função de onda para o segundo estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x).	42
5.5 Função de onda para o terceiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x).	42
5.6 Distribuição da probabilidade da função de onda para o terceiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x).	43

LISTA DE TABELA

5.1 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com $V_1 = 130,62$ eV e $V_0 = 50$ eV. . .	34
5.2 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição o rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 130,62$ eV e $V_0 = 50$ eV.	35
5.3 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com $V_1 = 0,99$ eV e $V_0 = 0,2$ eV . . .	37
5.4 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e o rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 0,99$ eV e $V_0 = 0,2$ eV	38
5.5 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 1,5 eV e 0,675 eV de profundidade e $L = 2$ nm.	38
5.6 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e o rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 1,5$ eV e $V_0 = 0,675$ eV, de profundidade e $L = 2$ nm	39
5.7 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 1,5eV e 0,675eV de profundidade e $L = 2,8$ nm.	40
5.8 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição o rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 1,5$ eV e $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2,8$ nm.	40

SUMÁRIO

1. Introdução.	1
2. Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico	4
2.1 Descrição.	4
2.2 Solução Analítica.	5
2.2.1 Energia Total menor que a barreira de potencial.	5
2.2.2 Energia maior que a barreira de potencial.	9
2.3 Sistemas de dois níveis.	11
2.3.1 Descrição.	11
2.3.2 Efeito da perturbação nos estados estacionários do sistema.	13
2.3.3 Aspecto dinâmico: Oscilação do sistema entre dois estados não perturbados.	16
2.3.3.a Evolução do vetor estado.	16
2.3.3.b Cálculo da probabilidade $P_{12}(t)$; Fórmula de Rabi.	18
3. Poço Duplo Quadrado Unidimensional Assimétrico.	20
3.1 Descrição.	20
3.2 Solução Analítica.	21
3.2.1 Energia do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$	22
3.2.2 Energia do sistema entre os dois mínimos de potencial.	24
3.2.3 Energia acima da barreira de potencial central.	26
3.3 Redução da solução obtida para o caso simétrico.	27
3.4 Tempo de transição eletrônica.	28
4. Um modelo para a transferência de elétrons.	30
5. Exemplos Numéricos e o estudo de sistemas biológicos característicos.	32

5.1 Exemplo Numérico.	34
5.2. Sistema Biológico Característico	35
5.2.1 PDQUA: $V_1 = 0,99$ eV, $V_0 = 0,2$ eV, $L = 2$ nm e $a = 1$ nm	37
5.2.2 PDQUA: $V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2$ nm e $a = 1$ nm.	38
5.2.3 PDQUA: $V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2,8$ nm e $a = 1$ nm.	39
5.3 Estudo das funções de onda envolvidas no modelo proposto.	41
6. Conclusão.	44
Referências Bibliográficas.	46
Apêndice A: Diagonalização de uma matriz Hermitiana 2x2.	47
Apêndice B: Gráficos das equações transcendentais em função da energia.	53

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Muitos fenômenos naturais se processam através de transporte de partículas. Todas as partículas podem ser transportadas, como prótons, núcleos e elétrons.

As reações de transferência de elétrons (TE) são indispensáveis para o desenvolvimento da vida. Em sistemas físicos, químicos e biológicos esse tipo de reação está relacionado à transferência de energia. Vários exemplos podem ser citados, entre eles: fotossíntese, respiração celular, além das interações entre proteínas e outros. Por este motivo o fenômeno de transferência eletrônica é uma das áreas de pesquisa mais amplas das ciências moleculares modernas, seja pela motivação biológica (fotossíntese, fosforização oxidativa) ou tecnológica (nanotecnologia) [1].

O estudo da dinâmica dos processos biológicos foi sendo aprimorado cada vez mais devido a uma grande curiosidade por sistemas envolvendo TE. Desde 1960 pesquisadores tem estudado transferência eletrônica em citocromo *c* [2]. Devault em 1966 (vide referência [3]) sugeriu que o transporte de elétrons, pela pequena massa do elétron, poderia ser tratado quanticamente. Em seguida, Devault [4] relatou experimentos que mostram a independência da temperatura em processos de TE a baixas temperaturas. Pesquisas mostraram que com a diminuição da temperatura havia também uma diminuição da TE, porém a partir de uma certa temperatura a TE se mantia constante. Essa independência levou a conclusão de que a TE neste caso ocorre por tunelamento eletrônico.

Segundo Marcus [5], cuja teoria é uma das mais importantes no estudo de TE, a taxa de transferência eletrônica em solução é determinada por dois fatores: o grau de interação eletrônica e mudanças nas configurações nucleares do doador e do receptor quando ganha ou perde um elétron.

São caracterizados como doador todo átomo que ao se ionizar doa um elétron para a banda de condução e em temperaturas muito baixas o elétron permanece associado ao átomo. São chamados de receptores os átomos que aceitam elétrons da banda de valência para completar as ligações covalentes com os átomos vizinhos, deixando buracos nas bandas. Em

temperaturas muito baixas, o buraco permanece associado ao átomo [6]. Essa transição de elétrons existente entre os doadores e os receptores exige uma certa quantidade de energia, sendo assim um elétron sobe um nível de energia quando ganha energia, enquanto um buraco desce ao ganhar energia.

Neste trabalho é sugerido um possível modelo para a TE utilizando uma das geometrias para o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico (PDQUA).

Um aspecto importante a ser destacado é que os poços quadrados, principalmente aqueles envolvendo dois mínimos (biestáveis), permitem cálculos exatos de tempo de tunelamento. O tunelamento é um fenômeno quântico bastante importante que se relaciona com barreiras de energia potencial. Ele é usado para explicar, por exemplo, o movimento de prótons em ligações de hidrogênio [7], a inversão intramolecular da amônia [7] e a transferência de elétrons em proteínas [4].

Poços de potenciais quadráticos biestáveis podem ser classificados como simétricos [8] ou assimétricos. Poços duplos simétricos são aqueles em que os dois poços têm mesma largura, profundidade e barreiras. Nos poços assimétricos, pelo menos um desses parâmetros é diferente. Neste trabalho são estudados aqueles em que apenas as profundidades dos dois poços, que formam o poço duplo assimétrico, são diferentes. Esse tipo de poço duplo assimétrico possibilita o aprisionamento de uma partícula, devido à diferença de profundidade dos dois poços.

No Capítulo 2 é resolvido o poço duplo quadrado unidimensional simétrico (PDQUS), determinando a solução da Equação de Schrödinger independente do tempo [8] desse sistema. Também é estudado sistemas de dois níveis e deduzida a fórmula de Rabi, que possibilita estimar o tempo de tunelamento, já que no PDQUS todos os estados são ressonantes. No próximo capítulo é resolvido, seguindo o mesmo raciocínio do capítulo anterior, o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico, poço tomado como modelo para o estudo da TE. Para verificar a consistência do resultado obtido é feita uma aproximação do PDQUA para o PDQUS. Ainda neste capítulo é estimado o tempo de transição de um estado eletrônico para outro.

No capítulo 4 é proposto um possível modelo para TE utilizando o PDQUA. Exemplos numéricos, determinando os autovalores de energia juntamente com a taxa de tunelamento pela fórmula de Rabi [7], o tempo de transição eletrônica, são mostrados no capítulo 5. Neste mesmo capítulo é feita uma pequena apresentação do sistema biológico característico, cujos

parâmetros serviram de inspiração para outros exemplos do PDQUA. Por fim, no último capítulo é apresentada a conclusão de todo este trabalho.

CAPÍTULO 2

POÇO DUPLO QUADRADO UNIDIMENSIONAL SIMÉTRICO

2.1 Descrição

Poços de potenciais quadrados têm sido bastante explorados, tanto do ponto de vista de aplicação como introdução didática à Mecânica Quântica. Existem bem poucos potenciais desse tipo que são tratados analiticamente na literatura, embora várias geometrias envolvendo esses poços de potenciais possam ser construídas.

O poço duplo quadrado unidimensional simétrico [8] possui cinco diferentes regiões representadas na figura 2.1. A região III desta figura é uma barreira de potencial V_0 que separa os poços mais profundos das regiões II e IV, onde o potencial é considerado nulo. Nos extremos opostos deste poço, regiões I e V, o potencial é infinito. O objetivo deste capítulo é resolver o PDQUS obtendo as equações transcendentais, que determinam os níveis de energia e suas autofunções.

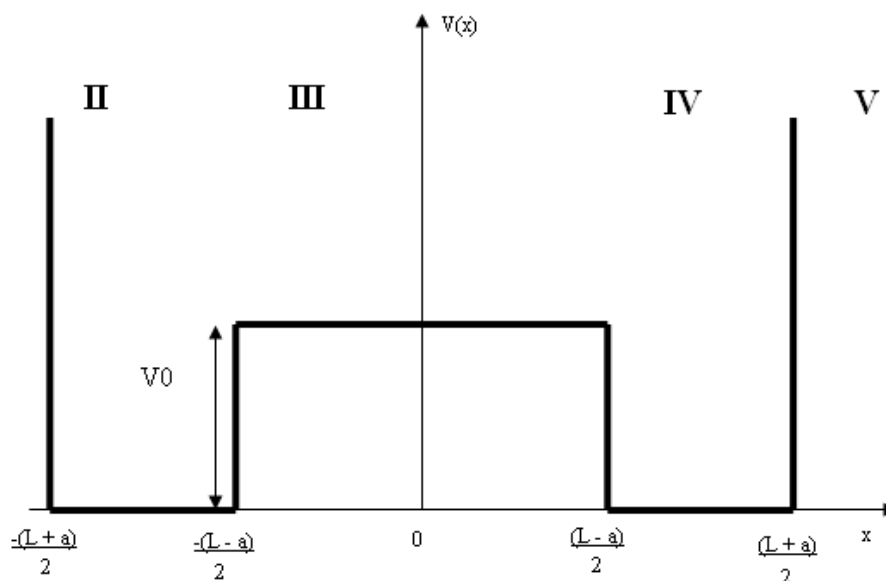


Figura 2.1- Representação do poço duplo quadrado unidimensional simétrico.

2.2 Solução Analítica

O potencial $V(x)$ a ser estudado é descrito por:

$$V(x) = \infty \quad x < -\frac{(L+a)}{2} \quad (\text{I})$$

$$V(x) = 0 \quad -\frac{(L+a)}{2} < x < -\frac{(L-a)}{2} \quad (\text{II})$$

$$V(x) = V_0 \quad -\frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L-a)}{2} \quad (\text{III}) \quad (2.1)$$

$$V(x) = 0 \quad \frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L+a)}{2} \quad (\text{IV})$$

$$V(x) = \infty \quad x > \frac{(L+a)}{2} \quad (\text{V})$$

Os algarismos romanos indicam as regiões espaciais que o potencial é constante, como pode ser visto na figura 2.1.

A equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo tem a seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (2.2)$$

e pode ser aplicada nas diversas regiões:

$$\text{Região II e IV: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (2.3)$$

$$\text{Região III: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V_0(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (2.4)$$

2.2.1 Energia total menor que a barreira de potencial

Considerando o sistema como sendo uma partícula sujeita ao poço de potencial e sua energia total do sistema como sendo menor que a barreira de potencial ($E < V_0$), pode-se determinar as autofunções de cada região; ou seja:

Região I: $\Psi(x) = 0.$ (2.5)

Região II: $\Psi(x) = A_1 \text{sen}(kx) + A_2 \cos(kx).$ (2.6)

Região III: $\Psi(x) = B e^{\beta x} + C e^{-\beta x}.$ (2.7)

Região IV: $\Psi(x) = D_1 \text{sen}(kx) + D_2 \cos(kx).$ (2.8)

Região V: $\Psi(x) = 0.$ (2.9)

Nas expressões acima, equações (2.5) – (2.8), adotou-se:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{2.10}$$

e
$$\beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}. \tag{2.11}$$

Nas equações (2.10) e (2.11) A_1, A_2, B, C, D_1 e D_2 são constantes.

Nas regiões I e V a função de onda é nula devido ao potencial ser infinito. Isso significa que nas fronteiras externas dos poços, $\Psi(x)$ satisfaz as seguintes condições de contorno:

$$\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = \Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0. \tag{2.12}$$

Aplicando estas condições na solução da região II, equação (2.6), obtem-se:

$$\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = A_1 \text{sen}k\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] + A_2 \cos k\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = 0, \tag{2.13}$$

e na solução da região IV, equação (2.8), obtem-se:

$$\Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = D_1 \text{sen}k\left[\frac{(L+a)}{2}\right] + D_2 \cos k\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0. \tag{2.14}$$

Para que as equações (2.13) e (2.14) sejam iguais a zero nas fronteiras externas do poço é necessário que uma das opções a seguir seja obedecida:

Opção 1:

$$A_1 = D_1 = 0, \tag{2.15}$$

e

$$\Psi(x) = A_2 \cos k\left[x + \frac{\pi}{2} + \frac{(L+a)}{2}\right], \text{ (região II)} \tag{2.16}$$

$$\Psi(x) = D_2 \cos k \left[x + \frac{\pi}{2} - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (\text{região IV}) \quad (2.17)$$

Uma outra possibilidade de obter as equações (2.13) e (2.14) é:

Opção 2:

$$A_2 = D_2 = 0, \quad (2.18)$$

e

$$\Psi(x) = A_1 \text{sen} k \left[x + \frac{(L+a)}{2} \right], \quad (\text{região II}) \quad (2.19)$$

$$\Psi(x) = D_1 \text{sen} k \left[x - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (\text{região IV}) \quad (2.20)$$

As duas opções descritas acima levam a solução do problema. Trabalhando com a opção 2, o próximo passo é aplicar a continuidade nas funções de onda e suas derivadas nos pontos $x = \pm \frac{(L-a)}{2}$. Então, para $x = -\frac{(L-a)}{2}$ tem-se:

$$A_1 \text{sen}(ka) = B e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} \quad (2.21)$$

e

$$A_1 k \cos(ka) = B \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}. \quad (2.22)$$

Para $x = \frac{(L-a)}{2}$ tem-se:

$$-D_1 \text{sen}(ka) = B e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} \quad (2.23)$$

e

$$D_1 k \cos(ka) = B \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}. \quad (2.24)$$

As equações (2.21) e (2.23) correspondem à continuidade da função de onda nos pontos indicados acima. As equações (2.22) e (2.24) correspondem à continuidade da derivada da função de onda nesses pontos.

Isolando A_1 da equação (2.21) e substituindo em (2.22), tem-se:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta + k \cot(ka)) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta - k \cot(ka)) e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (2.25)$$

O valor da constante D_1 pode ser obtido seguindo o mesmo raciocínio. Isolando D_1 da equação (2.23) e substituindo em (2.24), chega-se a:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta - k \cot(ka))e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta + k \cot(ka))e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (2.26)$$

O mesmo raciocínio pode ser feito para a opção 1, chegando nos seguintes resultados:

$$\frac{B}{C} = \frac{\left(\beta - k \tan k\left(a + \frac{\pi}{2}\right)\right)e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{\left(\beta + k \tan k\left(a + \frac{\pi}{2}\right)\right)e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}, \quad (2.27)$$

e

$$\frac{B}{C} = \frac{\left(\beta - k \tan k\left(-a + \frac{\pi}{2}\right)\right)e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{\left(\beta + k \tan k\left(-a + \frac{\pi}{2}\right)\right)e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (2.28)$$

Lembrando que $\cot(ka) = -\tan k\left(a + \frac{\pi}{2}\right) = \tan k\left(-a + \frac{\pi}{2}\right)$, chega-se que a equação (2.25) é igual a (2.27) e a equação (2.26) é equivalente a (2.28). Portanto as opções 1 e 2 levam ao mesmo resultado.

Igualando a equação (2.25) com (2.26), obtém-se:

$$\left[\frac{(\beta + k \cot(ka))}{(\beta - k \cot(ka))}\right]^2 = e^{-2\beta(L-a)}, \quad (2.29)$$

ou seja,

$$\frac{(\beta + k \cot(ka))}{(\beta - k \cot(ka))} = \pm e^{-\beta(L-a)}. \quad (2.30)$$

Com um desenvolvimento algébrico a relação acima pode ser reescrita em termos de funções hiperbólicas, cujo resultado é consistente ao obtido na referência [8]. Assim, a equação (2.30) passa a ser escrita por duas expressões:

$$k \cot(ka) = -\beta \tanh \frac{\beta(L-a)}{2}, \quad (2.31.a)$$

$$k \cot(ka) = -\beta \coth \frac{\beta(L-a)}{2}. \quad (2.31.b)$$

Com essas equações transcendentais, equação (2.31a) e (2.31b), é possível obter os autovalores de energia dentro do poço, através da intersecção das curvas dessas equações em função da energia.

2.2.2 Energia maior que a barreira de potencial

O mesmo raciocínio feito para a energia menor que o valor da barreira V_0 , pode ser feito para a energia total maior que a barreira de potencial ($E > V_0$). Quando a energia do sistema é maior que a barreira de potencial V_0 , a solução do problema nas respectivas regiões espaciais é dada por:

$$\text{Região I: } \Psi(x) = 0. \quad (2.32)$$

$$\text{Região II: } \Psi(x) = A_1 \text{sen}(kx) + A_2 \text{cos}(kx). \quad (2.33)$$

$$\text{Região III: } \Psi(x) = B \text{sen}(\beta x) + C \text{cos}(\beta x). \quad (2.34)$$

$$\text{Região IV: } \Psi(x) = D_1 \text{sen}(kx) + D_2 \text{cos}(kx). \quad (2.35)$$

$$\text{Região V: } \Psi(x) = 0. \quad (2.36)$$

Nesse caso, são definidas:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.37)$$

e

$$\beta^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}, \quad (2.38)$$

Nas equações (2.37) e (2.38) A_1, A_2, B, C, D_1 e D_2 são constantes.

O mesmo procedimento feito para a função de onda nas fronteiras externas do poço para a energia menor que a barreira de potencial, pode ser utilizado neste caso. Como a função de onda permanece a mesma nas regiões II e IV o resultado desta análise é o mesmo já discutido anteriormente. Considerando $A_2 = D_2 = 0$, tem-se:

Região II:

$$\Psi(x) = A_1 \text{sen}k \left[x + \frac{(L+a)}{2} \right], \quad (2.39)$$

Região IV:

$$\Psi(x) = D_1 \text{senk} \left[x - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (2.40)$$

A função de onda tem que ser contínua em $x = \pm \left(\frac{L-a}{2} \right)$, então para $x = -\left(\frac{L-a}{2} \right)$,

tem-se:

$$A_1 \text{sen}(ka) = -B \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) + C \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \quad (2.41)$$

e

$$A_1 k \cos(ka) = B \beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) + C \beta \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right). \quad (2.42)$$

Por outro lado, para $x = \left(\frac{L-a}{2} \right)$, tem-se:

$$-D_1 \text{sen}(ka) = B \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) + C \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \quad (2.43)$$

e

$$D_1 k \cos(ka) = B \beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) - C \beta \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right). \quad (2.44)$$

As equações (2.41) e (2.43) correspondem à continuidade das funções de onda nos dois pontos considerados, enquanto (2.42) e (2.44) representam a continuidade das derivadas destas funções nos pontos em questão.

Isolando A_1 na equação (2.41) e substituindo em (2.42), obtém-se:

$$\frac{B}{C} = \frac{-k \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka) + \beta \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right)}{-k \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka) - \beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right)}. \quad (2.45)$$

Isolando D_1 na equação (2.43) e substituindo em (2.44), obtém-se:

$$\frac{B}{C} = \frac{-\beta \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) + k \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka)}{\beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) - k \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka)}. \quad (2.46)$$

Igualando a equação (2.45) e a (2.46), tem-se:

$$\beta \text{sen} \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) = k \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka), \quad (2.47)$$

resultando na equação transcendental:

$$\beta \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right] = k \cot(ka). \quad (2.48)$$

Porém, considerando a equação (2.47), obtém-se $B = 0$. A equação (2.46) pode ser reescrita como:

$$\frac{B}{C} = \frac{+ \beta \sin \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) - k \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka)}{+ \beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) + k \sin \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka)}. \quad (2.49)$$

Igualando a equação (2.45) com a equação (2.49), obtém-se:

$$\beta \cos \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) = -k \sin \beta \left(\frac{L-a}{2} \right) \cot(ka), \quad (2.50)$$

que resulta na equação transcendental:

$$-k \cot ka = \beta \cot \beta \left(\frac{L-a}{2} \right). \quad (2.51)$$

De acordo com a equação (2.50), $C = 0$.

Com as equações transcendentais (2.48) e (2.51) torna-se possível determinar os autovalores de energia acima da barreira central ($E > V_0$) através de uma análise gráfica, localizando o ponto de intersecção entre as curvas dessas equações em função da energia.

2.3 Sistemas de dois níveis

2.3.1 Descrição

O estudo apresentado aqui trata de um sistema de somente dois estados. A teoria é formulada em termos de um espaço vetorial sobre os números complexos, no qual está definido um produto escalar hermitiano [7].

Inicialmente o sistema físico é constituído de uma base com dois autoestados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ de um Hamiltoniano H_0 , cujos os autovalores são, respectivamente, E_1 e E_2 . Então pode-se escrever:

$$H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle, \quad (2.52)$$

$$H_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle.$$

Os autoestados formam uma base ortonormal, ou seja, o produto interno é zero e a norma é igual a um. Podendo escrever:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}, \text{ sendo } i,j = 1,2. \quad (2.53)$$

O símbolo δ é delta de Kronerker, significando que:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = 1 \quad i=j, \quad (2.54)$$

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = 0 \quad i \neq j.$$

Os autoestados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ são estados estacionários, sendo que para uma possível transição é conveniente assumir uma perturbação externa. Considerando uma perturbação W associada à H_0 , tem-se que:

$$H = H_0 + W, \quad (2.55)$$

resultando nos novos autoestados e novos autovalores:

$$H|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle, \quad (2.56)$$

$$H|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle.$$

A perturbação W é representada pela matriz Hermitiana na base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$:

$$(W) = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Matrizes que representam operadores hermitianos em bases ortonormais se caracterizam por ter:

$$W_{12} = W_{21}^*, \quad (2.58)$$

enquanto W_{11} e W_{22} são reais, ou seja, a diagonal só possui números reais.

A primeira etapa do cálculo para obter a probabilidade de transição é determinar os autovalores E_+ e E_- em função dos antigos níveis de energia E_1 e E_2 . É necessário também estabelecer a relação entre os novos autoestados $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$ e os antigos $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$.

2.3.2 Efeito da perturbação nos estados estacionários do sistema

Considerando H_0 como sendo um operador hamiltoniano, linear e hermitiano, com uma representação diagonal e descrita por:

$$H_{0ij} = E_i \delta_{ij}, \quad (2.59)$$

é possível escrever esta equação (2.59) como matriz, na qual, os termos fora da diagonal são nulos, como mostrado a seguir:

$$\begin{pmatrix} H_{011} & H_{012} \\ H_{021} & H_{022} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Na base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$, a matriz representando H é escrita como:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

A diagonalização da matriz acima para encontrar os autovalores E_+ e E_- e os autovetores $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$ é efetuada em detalhes na apêndice A. Os autovalores, encontrados após a diagonalização, são:

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2}, \quad (2.62)$$

$$E_- = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2}.$$

Os autovetores em função dos autoestados iniciais $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, são:

$$|\Psi_+\rangle = \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\varphi_2\rangle. \quad (2.63)$$

$$|\Psi_-\rangle = -\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\varphi_2\rangle.$$

Assumindo que a matriz (W) é puramente não diagonal, isto é, $W_{11} = W_{22} = 0$, a expressão (2.62) torna-se:

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}, \quad (2.64)$$

$$E_- = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) - \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}.$$

Assumindo W_{12} fixo e adotando a seguinte notação:

$$E_m = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \quad (2.65)$$

e

$$\Delta = \frac{1}{2}(E_1 - E_2), \quad (2.66)$$

Os autovalores da relação (2.63) podem ser reescritos como:

$$E_+ = E_m + \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}, \quad (2.67)$$

$$E_- = E_m - \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}.$$

Variando o Δ na equação (2.61) o resultado gráfico são dois ramos de hipérbole simétrica cujas assíntotas são as duas linhas retas associadas aos níveis não perturbados. Na ausência de perturbação, os níveis se cruzam na origem (linhas tracejadas na figura 2.2). Com o aumento da perturbação W , os dois níveis perturbados se afastam entre si. Quando $\Delta = 0$, tem-se que $E_1 = E_2$ e os níveis perturbados podem ser escritos como:

$$E_+ = E_m + |W_{12}|, \quad (2.68)$$

$$E_- = E_m - |W_{12}|.$$

Com as expressões da equação (2.68), fazendo $E_+ - E_-$ obtém-se uma separação mínima de $2|W_{12}|$ das curvas E_+ e E_- em $\Delta = 0$ como mostrado na figura (2.2). As assíntotas se cruzam na origem, ou seja, $E_1 = E_2 = 0$. Nessas condições pela equação tem-se que $E_m = 0$, resultando em $E_+ = |W_{12}|$ e $E_- = -|W_{12}|$.

Analisando a equação (2.66) é possível perceber que, se $E_1 > E_2$, então E_+ aproxima-se de E_1 e E_- aproxima-se de E_2 . Por outro lado, se $E_1 < E_2$, então E_+ aproxima-

se de E_2 , e E_- aproxima-se de E_1 . Estas comparações podem ser visualizadas nos gráficos mostrados na figura 2.2.

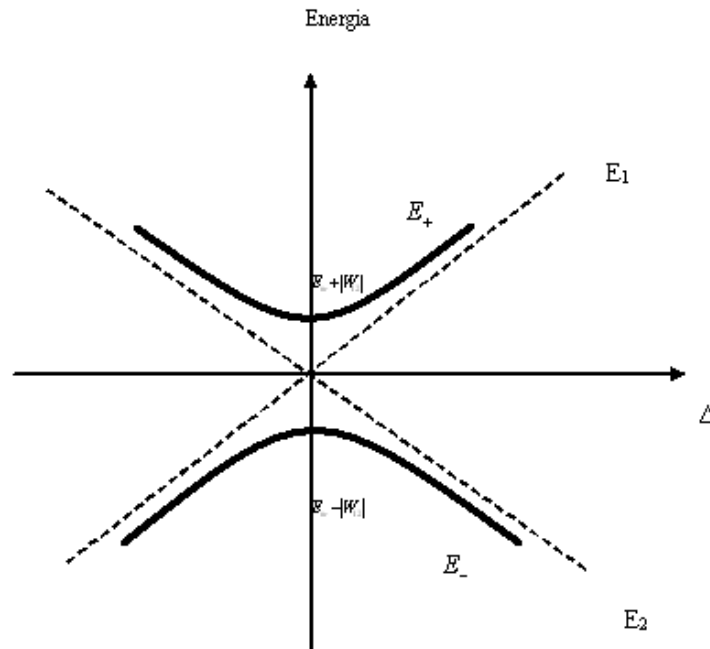


Figura 2.2-Gráfico da variação das energias E_+ e E_- em relação e diferença de energia Δ .

Nas proximidades das assíntotas, isto é, para $|\Delta| \gg |W_{12}|$, as fórmulas em (2.64) podem ser escritas na forma de uma expansão em série de potências em $\left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|$ como segue:

$$E_+ = E_m + \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|^2 + \dots \right),$$

$$E_- = E_m - \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|^2 + \dots \right).$$

(2.69)

Através da análise do gráfico da variação das energias E_+ e E_- em relação à diferença de energia Δ é possível concluir que o efeito da perturbação é mais importante quando os níveis não perturbados possuem a mesma energia. Observa-se também que para uma perturbação fraca, ou seja, $E_1 - E_2 \gg |W_{12}|$, os estados perturbados diferem pouco dos

estados não perturbados. Quando a perturbação é forte ($E_1 - E_2 \ll |W_{12}|$) os estados $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$ são muito diferentes dos estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$.

2.3.3 Aspecto dinâmico: oscilação do sistema entre dois estados não perturbados

2.3.3.a Evolução do vetor estado

Considere um vetor de estado Ψ dependente do tempo, escrito em termos dos autoestados do hamiltoniano não perturbado $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$; ou seja:

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t)|\varphi_1\rangle + a_2(t)|\varphi_2\rangle. \quad (2.70)$$

A função de onda do elétron livre é dada por :

$$\Psi(t, x) = A e^{-\frac{i(Et - px)}{\hbar}}, \quad (2.71)$$

Derivando a equação acima em relação ao tempo, chega-se:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = E |\Psi(t)\rangle. \quad (2.72)$$

Na presença da perturbação W , a evolução do vetor $\Psi(t)$ é dada pela equação de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = (H) |\Psi(t)\rangle, \quad (2.73)$$

onde $H = H_0 + W$. Sendo W uma matriz não diagonal, o hamiltoniano pode ser escrito como uma matriz da forma:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & W_{12} \\ W_{21} & E_2 \end{pmatrix}. \quad (2.74)$$

A equação (2.73) pode ser reescrita como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & W_{12} \\ W_{21} & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix}, \quad (2.75)$$

ou seja,

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) = E_1 a_1(t) + W_{12} a_2(t), \quad (2.76)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) = W_{21} a_1(t) + E_2 a_2(t). \quad (2.77)$$

Considerando que $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ forma uma base, é sempre possível, para qualquer tempo t , expandir qualquer estado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema em termos de $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ [7]; ou seja:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t) |\varphi_{n,\tau}\rangle, \quad (2.78)$$

com:

$$c_{n,\tau}(t) = \langle \varphi_{n,\tau} | \Psi(t) \rangle. \quad (2.79)$$

Projetando a equação (2.78) na Equação de Schrödinger, obtém-se:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_{n,\tau}(t) = E_n c_{n,\tau}(t). \quad (2.80)$$

Essa equação pode ser integrada diretamente, resultando em:

$$c_{n,\tau}(t) = c_{n,\tau}(t_0) e^{\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}}. \quad (2.81)$$

Substituindo na equação (2.78), obtém-se:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0) e^{\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}} |\varphi_{n,\tau}\rangle. \quad (2.82)$$

Retornando ao nosso caso, no qual $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ é $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$; e $t_0 = 0$, a equação (2.82) é dada por:

$$|\psi(0)\rangle = \lambda |\Psi_+\rangle + \mu |\Psi_-\rangle, \quad (2.83)$$

onde os coeficientes λ e μ são fixados pelas condições iniciais, então, para um tempo t , tem-se:

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda e^{\frac{-iE_+t}{\hbar}} |\Psi_+\rangle + \mu e^{\frac{-iE_-t}{\hbar}} |\Psi_-\rangle. \quad (2.84)$$

Assumindo que o sistema em $t = 0$ está em $|\varphi_1\rangle$:

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle \quad (2.85)$$

pode-se calcular a probabilidade de encontrá-lo no estado $|\varphi_2\rangle$ em um tempo t .

2.3.3.b Cálculo da probabilidade $P_{12}(t)$; Fórmula de Rabi

Antes de iniciar o cálculo da probabilidade é necessário conhecer o estado inicial $|\varphi_1\rangle$ e também $|\varphi_2\rangle$. Este processo é feito no apêndice A através da inversão dos autovetores $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$.

Tomando a condição inicial $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$, o estado inicial torna-se igual a:

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\Psi_+\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\Psi_-\rangle. \quad (2.86)$$

Comparando com a equação (2.83), chega-se nos valores de λ e μ , como sendo:

$$\lambda = \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \quad (2.87)$$

e

$$\mu = -\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]}. \quad (2.88)$$

Assim, voltando a equação (2.84), tem-se

$$|\Psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] e^{\frac{-iE_+t}{\hbar}} |\Psi_+\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] e^{\frac{-iE_-t}{\hbar}} |\Psi_-\rangle. \quad (2.89)$$

A probabilidade de transição por sua vez é dada por $P_{12}(t) = |\langle \varphi_2 | \Psi(t) \rangle|^2$,

sendo que:

$$\langle \varphi_2 | \Psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(e^{\frac{-iE_+ t}{\hbar}} - e^{\frac{-iE_- t}{\hbar}} \right). \quad (2.90)$$

Elevando a expressão acima ao quadrado chega-se a

$$\begin{aligned} P_{12}(t) &= \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} \text{sen}^2 \left[\frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar} \right] \\ &= \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} \text{sen}^2 \left[\frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} t}{2\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Esta equação é chamada fórmula de Rabi [7] e fornece a probabilidade de transição do sistema entre o estado $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ durante um tempo t .

Analisando a equação (2.91) verifica-se que o valor máximo ocorre quando:

$$\frac{(E_+ - E_-)T}{2\hbar} = \frac{(2k+1)\pi}{2}. \quad (2.92)$$

Essa equação fornece um período de oscilação, extraída a função Seno, que vale:

$$T = \frac{(2k+1)\pi\hbar}{(E_+ - E_-)}; \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.93)$$

Quando os estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ têm a mesma energia não perturbada, $E_1 = E_2$, tem-se

$(E_+ - E_-) = 2|W_{12}|$ e $\left\{ \frac{4|W_{12}|^2}{[(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2]} \right\}$ torna-se igual ao valor um. Neste caso trata-se

de um sistema ressonante correspondendo então ao máximo de probabilidade. Para sistemas

não ressonantes o termo $\left\{ \frac{4|W_{12}|^2}{[(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2]} \right\}$ é menor que o valor um.

Portanto o período passa a ser, $T = \frac{(2k+1)\pi\hbar}{2|W_{12}|}$, ou seja, se o sistema está inicialmente no

estado $|\varphi_1\rangle$, após transcorrido um tempo T irá se encontrar no estado $|\varphi_2\rangle$.

CAPÍTULO 3

POÇO DUPLO QUADRADO UNIDIMENSIONAL ASSIMÉTRICO

3.1 Descrição

O objetivo deste capítulo é encontrar a solução analítica da equação de Schrödinger independente do tempo para o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico (PDQUA). Este poço pode ser usado, por exemplo, no aprisionamento atômico e transferência eletrônica devido à diferença de profundidades, V_0 e V_1 , entre poços vizinhos, no qual $V_1 > V_0$. A representação do potencial $V(x)$ se encontra na figura 3.1. Nesta figura existem cinco regiões indicadas, onde a barreira de potencial V_0 está situada à esquerda da região III e a outra de potencial V_1 localizada à direita. Esta região separa os poços da região II e IV. O potencial na região II é $V_1 - V_0$ e na região IV é nulo. Nas regiões I e V o potencial é infinito. Neste capítulo são obtidas as equações transcendentais para a energia do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$, para energia entre o dois mínimos de potencial e para energia acima da barreira de potencial central.

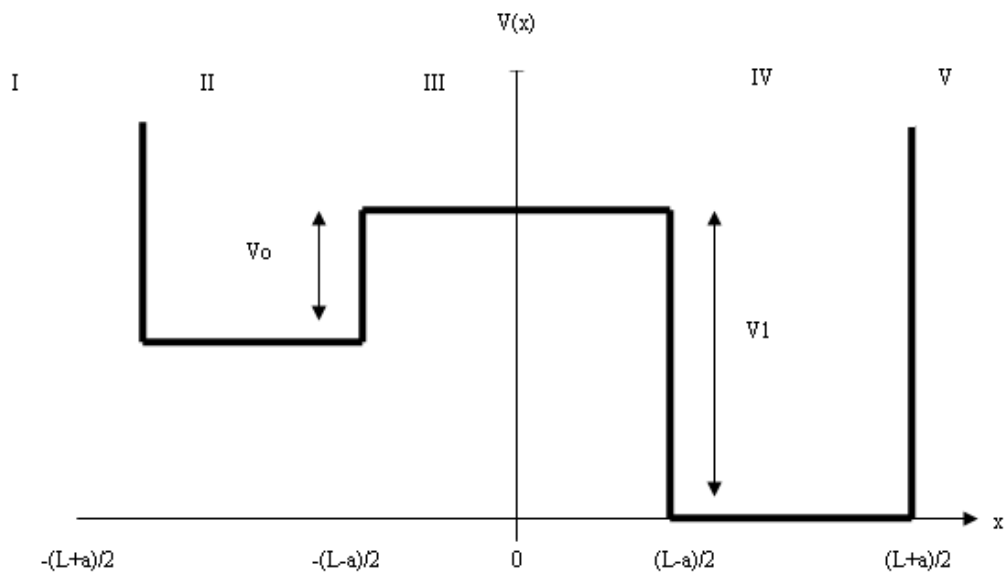


Figura 3.1 – Representação do $V(x)$ no poço duplo quadrado unidimensional assimétrico.

3.2 Solução Analítica

O potencial assimétrico, $V_{as}(x)$, como descrito acima e indicado na figura 3.1, pode ser escrito por:

$$\begin{aligned}
 V_{as}(x) &= \infty & x < -\frac{(L+a)}{2} & \quad \text{(I)} \\
 V_{as}(x) &= (V_1 - V_0) & -\frac{(L+a)}{2} < x < -\frac{(L-a)}{2} & \quad \text{(II)} \\
 V_{as}(x) &= V_1 & -\frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L-a)}{2} & \quad \text{(III)} \\
 V_{as}(x) &= 0 & \frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L+a)}{2} & \quad \text{(IV)} \\
 V_{as}(x) &= \infty & x > \frac{(L+a)}{2} & \quad \text{(V)}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Uma vez que a função de onda é zero nas regiões I e V, a equação de Schrödinger independente do tempo é aplicada nas regiões II, III e IV:

$$\text{Região II: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V_1 \Psi(x) - V_0 \Psi(x) = E \Psi(x), \tag{3.2}$$

$$\text{Região III: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V_1 \Psi(x) = E \Psi(x), \tag{3.3}$$

$$\text{Região IV: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E \Psi(x), \tag{3.4}$$

Podemos identificar três casos distintos para este poço. O primeiro ocorre quando a energia é menor que $V_1 - V_0$ [$0 < E < (V_1 - V_0)$], nesse caso há apenas possibilidade de ocorrer níveis de energia no poço mais profundo. O segundo caso ocorre quando o valor da energia total está entre os valores da altura das barreiras [$(V_1 - V_0) < E < V_1$], nessa situação é possível que a função de onda se distribua nos dois poços. Por fim, quando a energia é maior que V_1 [$E > V_1$] os níveis de energia estarão acima da barreira de potencial interna.

3.2.1 Energia do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$

O primeiro caso estudado refere-se a $[E < (V_1 - V_0)]$. Nessa situação, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo para as cinco regiões do poço duplo quadrado unidimensional assimétrico é dada por:

$$\text{Região I e V: } \Psi(x) = 0, \quad (3.5)$$

$$\text{Região II: } \Psi(x) = A_1 e^{k_1 x} + A_2 e^{-k_1 x} \quad (3.6)$$

$$\text{Região III: } \Psi(x) = B e^{\beta x} + C e^{-\beta x} \quad (3.7)$$

$$\text{Região IV: } \Psi(x) = D_1 \text{sen}(k_2 x) + D_2 \text{cos}(k_2 x), \quad (3.8)$$

com A_1, A_2, B, C, D_1, D_2 sendo constantes a serem determinadas pela continuidade da função de onda e sua derivada, além da condição de normalização. Os parâmetros k_1, k_2 e β foram introduzidos para simplificar a notação, para esse caso eles valem:

$$k_1^2 = \frac{2m[(V_1 - V_0) - E]}{\hbar^2}, \quad (3.9)$$

$$\beta^2 = \frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}, \quad (3.10)$$

$$k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.11)$$

Nas regiões I e V a função de onda é nula devido ao potencial ser infinito. Isso significa que, nas fronteiras externas dos poços, $\Psi(x)$ satisfaz:

$$\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = \Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0. \text{ Aplicando esta condição na região II, obtemos a seguinte}$$

relação:

$$A_1 = -A_2 e^{k_1(L+a)}. \quad (3.12)$$

A solução da região IV é reduzida da seguinte forma:

$$\Psi(x) = D_1 \text{sen} k_2 \left[x - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (3.13)$$

Outra condição a ser usada é a continuidade das funções de onda e suas derivadas nos pontos $x = \pm \frac{(L-a)}{2}$. Isso implica para $x = -\frac{(L-a)}{2}$ que:

$$A_1 e^{-\frac{k_1(L-a)}{2}} + A_2 e^{\frac{k_1(L-a)}{2}} = B e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}, \quad (3.14)$$

$$A_1 k_1 e^{-\frac{k_1(L-a)}{2}} - A_2 k_1 e^{\frac{k_1(L-a)}{2}} = B \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}, \quad (3.15)$$

e para $x = \frac{(L-a)}{2}$ que:

$$-D_1 \operatorname{sen}(k_2 a) = B e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}, \quad (3.16)$$

$$D_1 k_2 \cos(k_2 a) = B \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}. \quad (3.17)$$

As equações (3.14) e (3.16) correspondem à continuidade da função de onda nos pontos indicados e as equações (3.15) e (3.17) correspondem à continuidade das derivadas das funções de onda.

Para obter uma relação entre essas equações, o primeiro passo é substituir a equação (3.12) na equação (3.14) encontrando uma expressão de A_2 em função das constantes B e C. Outra expressão para A_2 em função das mesmas constantes pode ser encontrada substituindo a equação (3.12) na equação (3.15). Igualando essas duas expressões é possível obter a seguinte relação:

$$\frac{B}{C} = \frac{[(k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)} + (k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)}]e^{\beta(L-a)}}{[(-k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)} - (k_1 + \beta)e^{k_1(L-a)}]}. \quad (3.18)$$

Por outro lado, isolando D_1 da equação (3.16) e substituindo em (3.17) chega-se a:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta - k_2 \cot(k_2 a))e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta + k_2 \cot(k_2 a))e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (3.19)$$

Para obter a equação transcendental para o caso em que $[0 < E < V_1 - V_0]$ basta igualar a equação (3.18) com a equação (3.19), resultando em:

$$\frac{[(k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)} + (k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)}]e^{\beta(L-a)}}{[(-k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)} - (k_1 + \beta)e^{k_1(L-a)}]} = \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)]e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}. \quad (3.20)$$

Com o gráfico desta equação transcendental em função da energia é possível obter os autovalores de energia abaixo de $(V_1 - V_0)$, pois β , k_2 e k_1 são expressões que contém a energia.

3.2.2 Energia do sistema entre os dois mínimos de potencial

Considerando o segundo caso [$V_1 - V_0 < E < V_1$], a solução da Equação de Schrödinger em cada região é dada por:

$$\text{Regiões I e V: } \Psi(x) = 0, \quad (3.21)$$

$$\text{Região II: } \Psi(x) = A_1 \text{sen}(k_1 x) + A_2 \text{cos}(k_1 x). \quad (3.22)$$

$$\text{Região III: } \Psi(x) = B e^{\beta x} + C e^{-\beta x}. \quad (3.23)$$

$$\text{Região IV: } \Psi(x) = D_1 \text{sen}(k_2 x) + D_2 \text{cos}(k_2 x). \quad (3.24)$$

sendo que A_1, A_2, B, C, D_1, D_2 são constantes obtidas pela continuidade da função de onda e sua derivada e pela condição de normalização. Nessas diferentes regiões são dados:

$$k_1^2 = \frac{2m[E - (V_1 - V_0)]}{\hbar^2}, \quad (3.25)$$

$$\beta^2 = \frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2} \quad (3.26)$$

e

$$k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.27)$$

Lembrando que nas regiões I e V a função de onda é nula, resultando na condição $\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = \Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0$. Aplicando esta condição nas soluções da região II e da região IV obtemos as funções de onda, respectivamente:

$$\Psi(x) = A_1 \text{sen} k_1 \left[x + \frac{(L+a)}{2} \right] \quad (3.28)$$

e

$$\Psi(x) = D_1 \text{sen} k_2 \left[x - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (3.29)$$

Outra condição a ser usada é a continuidade das funções de onda e suas derivadas nos pontos

$$x = \pm \frac{(L-a)}{2}. \text{ Isso implica para } x = -\frac{(L-a)}{2} :$$

$$A_1 \text{sen}(k_1 a) = B e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} \quad (3.30)$$

e

$$A_1 k_1 \cos(k_1 a) = B \beta e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}. \quad (3.31)$$

Por outro lado para $x = \frac{(L-a)}{2}$:

$$-D_1 \text{sen}(k_2 a) = B e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}} \quad (3.32)$$

e

$$D_1 k_2 \cos(k_2 a) = B \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}}. \quad (3.33)$$

As equações (3.30) e (3.32) correspondem à continuidade da função de onda nos pontos indicados e as equações (3.31) e (3.33) correspondem à continuidade das derivadas dessas funções de onda.

Para obter uma relação entre essas equações, é possível isolar A_1 da equação (3.30) e substituir na equação (3.31) obtendo:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta + k_1 \cot(k_1 a)) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta - k_1 \cot(k_1 a)) e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}}}. \quad (3.34)$$

Por outro lado, isolando D_1 da equação (3.32) e substituindo em (3.33) chega-se a:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta - k_2 \cot(k_2 a)) e^{\frac{-\beta(L-a)}{2}}}{(\beta + k_2 \cot(k_2 a)) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (3.35)$$

Finalmente, para obter a equação transcendental para o caso em que $[(V_1 - V_0) < E < V_1]$ basta igualar a equação (3.34) e a (3.35), resultando em:

$$\frac{[\beta + k_1 \cot(k_1 a)] e^{\beta(L-a)}}{[\beta - k_1 \cot(k_1 a)]} = \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)] e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}. \quad (3.36)$$

Com a equação (3.36) torna-se possível conhecer os autovalores de energia entre os dois mínimos de potencial, através do ponto de intersecção do gráfico desta equação em função da energia.

3.2.3 Energia acima da barreira de potencial central

O terceiro caso para o poço duplo assimétrico é quando a energia é maior que a barreira de potencial V_1 ($E > V_1$). A solução da equação de Schrödinger independente do tempo para as cinco regiões do poço duplo quadrado unidimensional assimétrico, neste caso, é dada por:

$$\text{Região I e V: } \Psi(x) = 0, \quad (3.37)$$

$$\text{Região II: } \Psi(x) = A_1 \text{sen}(k_1 x) + A_2 \text{cos}(k_1 x), \quad (3.38)$$

$$\text{Região III: } \Psi(x) = B \text{sen}(\beta x) + C \text{cos}(\beta x), \quad (3.39)$$

$$\text{Região IV: } \Psi(x) = D_1 \text{sen}(k_2 x) + D_2 \text{cos}(k_2 x), \quad (3.40)$$

Novamente, as constantes A_1, A_2, B, C, D_1, D_2 são obtidas pela continuidade da função de onda e sua derivada e pela constante de normalização. Também foram introduzidos os parâmetros:

$$k_1^2 = \frac{2m[E - (V_1 - V_0)]}{\hbar^2}, \quad (3.41)$$

$$\beta^2 = \frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2} \quad (3.42)$$

e

$$k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.43)$$

Aplicando a condição de que, a função de onda é igual a zero quando o potencial for infinito nas soluções da região II e da região IV, obtemos as funções de onda, respectivamente:

$$\Psi(x) = A_1 \text{sen} k_1 \left[x + \frac{(L+a)}{2} \right] \quad (3.44)$$

e

$$\Psi(x) = D_1 \text{sen} k_2 \left[x - \frac{(L+a)}{2} \right]. \quad (3.45)$$

Seguindo os mesmos passos indicados nos casos anteriores, ou seja, adotando e considerando a continuidade na função de onda e na sua derivada em $x = \pm \frac{(L-a)}{2}$, chega-se as seguintes relações:

$$A_1 = \frac{B \operatorname{sen} \left[-\beta \frac{(L-a)}{2} \right] + C \cos \left[-\beta \frac{(L-a)}{2} \right]}{\operatorname{sen} k_1 a}, \quad (3.46)$$

$$B = \frac{\beta \tan \left[\frac{-\beta(L-a)}{2} \right] + k_1 \cot(k_1 a)}{-k_1 \tan \left[\frac{-\beta(L-a)}{2} \right] \cot(k_1 a) + \beta} C, \quad (3.47)$$

$$D_1 = \frac{-B \operatorname{sen} \left[\beta \frac{(L-a)}{2} \right] - C \cos \left[\beta \frac{(L-a)}{2} \right]}{\operatorname{sen} k_2 a}, \quad (3.48)$$

e

$$B = \frac{-k_2 \cot(k_2 a) + \beta \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right]}{\beta + k_2 \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right] \cot(k_2 a)} C. \quad (3.49)$$

Relacionando a equação (3.47) e a (3.49), tem-se a equação transcendental que permite a determinação dos autovalores de energia para ($E > V_1$):

$$\frac{-k_2 \cot(k_2 a) + \beta \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right]}{\beta + k_2 \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right] \cot(k_2 a)} = \frac{\beta \tan \left[\frac{-\beta(L-a)}{2} \right] + k_1 \cot(k_1 a)}{-k_1 \tan \left[\frac{-\beta(L-a)}{2} \right] \cot(k_1 a) + \beta}. \quad (3.50)$$

Com esse resultado o problema original é completamente resolvido. Particularmente, a energia do sistema é dada pela equação (3.20), (3.36) ou (3.50), dependendo do caso a ser analisado.

3.3 Redução da solução obtida para o caso simétrico

Usando as soluções conhecidas para a energia do poço simétrico é possível testar a validade da solução encontrada no caso assimétrico. Para que o poço duplo assimétrico se

reduza ao poço duplo simétrico basta fazer $V_0 = V_1$, isso implica em que $k = k_1 = k_2$. Usando essas relações na expressão (3.36), $E < V_1$, chega-se na equação: $\frac{(\beta + k \cot(ka))}{(\beta - k \cot(ka))} = \pm e^{-\beta(L-a)}$.

Manipulando algebricamente essa relação, reescrevendo-a em termos de funções hiperbólicas, é possível verificar que ela corresponde exatamente as equações (2.31a) e (2.31b).

Por outro lado, para $E > V_1$, a substituição de k_1 e k_2 por k (lembrando que $k = k_1 = k_2$) na expressão (3.50) fornece diretamente a equação (2.48) e (2.51), como esperado.

Esta análise mostra a consistência entre as soluções obtidas para os poços duplos quadrados unidimensionais simétrico e assimétrico.

3.4 Tempo de transição eletrônica

Segundo a teoria quântica não é possível determinar a posição e o momento de uma partícula com precisão maior que o Princípio da Incerteza de Heisenberg ou Princípio da Indeterminação [9]. Este princípio afirma que não é possível determinar simultaneamente a posição e o momento, onde p possui uma incerteza Δp e no mesmo instante x possui uma incerteza Δx , resultando da seguinte equação:

$$\langle \Delta x \rangle \langle \Delta p \rangle \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.51)$$

Se o momento p é medido exatamente, a incerteza na posição x é enorme ($\Delta p = 0$ e $\Delta x = \infty$) e se a posição é conhecida exatamente, a incerteza no momento p é infinita ($\Delta x = 0$ e $\Delta p = \infty$) [9].

Esse mesmo raciocínio pode ser empregado nas medidas da energia E e do tempo t , como no caso de emissão de um fóton com energia E na intervalo de tempo t , no qual:

$$\langle \Delta E \rangle \langle \Delta t \rangle \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.52)$$

sendo ΔE a incerteza da energia E e Δt a incerteza do intervalo de tempo t .

O tempo de transição do elétron de um nível para o outro, pode ser estimado pelo Princípio da Incerteza escrito na equação (3.52), como sendo:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{2\Delta E}, \quad (3.53)$$

Onde ΔE corresponde a variação dos níveis de energia do PDQUA estudado e Δt é uma estimativa do intervalo de transição eletrônica.

A equação (3.53) é muito semelhante a equação (2.93) para o tempo de tunelamento no Capítulo 2 deste trabalho, visto que a diferença está nos níveis de energia envolvidos, caracterizando assim o tempo que está sendo estudado.

CAPÍTULO 4

UM MODELO PARA A TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS

Utilizando a geometria do PDQUA é possível formar um modelo de transferência de carga. O modelo proposto é constituído de um sistema com uma distribuição de níveis bastante particular. O primeiro nível, o estado fundamental, está localizado somente no poço de maior profundidade. O segundo e terceiro nível de energia se encontram entre os dois poços, enquanto os outros níveis estão acima da barreira interna.

Considerando poços individuais, é possível que dois níveis de energia coincidam, esse caso é chamado de ressonante. Por outro lado, os níveis dos poços individuais podem não coincidir, o que leva ao caso não ressonante. Essa distinção é muito útil em estudos de tunelamento [10], sendo que quando os estados são ressonantes a probabilidade de tunelamento é muito maior que aquelas dos casos onde não há ressonância (vide, por exemplo, ref. [7] e a discussão feita na sessão 2.3 do Capítulo 3 deste trabalho). O caso ressonante é usado no modelo para possibilitar uma melhor caracterização e eficiência do tunelamento do elétron. Na ressonância há um desdobramento do nível de energia, resultando em um nível de energia abaixo do nível original e outro com energia acima, ambos com valores de energia próximos ao nível de energia do poço individual. O quarto nível de energia está localizado acima da barreira de potencial e é o primeiro nível dos infinitos níveis de energia presentes acima da barreira.

Depois de compreendido como é formado o poço estudado, é necessário entender todo o percurso que o elétron faz dentro deste sistema. Primeiramente, o elétron se encontra no poço de menor profundidade e no seu estado fundamental. Devido a essa configuração, o poço em que se encontra o elétron é o doador e o poço de maior profundidade é o receptor (passo 1 da figura 4.1). O elétron passa para o outro lado do poço por tunelamento, pois os níveis de energia são ressonantes. Nesse processo o poço receptor fica ionizado negativamente e o doador fica ionizado positivamente (passo 2 da figura 4.1). Quando o elétron tunela para o poço de maior profundidade ele não está mais no estado fundamental, sendo possível que ele decaia para o estado fundamental do poço maior, liberando uma quantidade h de energia. Esse processo resulta em uma transição eletrônica. No próximo

passo desse processo o elétron recebe uma quantidade de energia $h\nu$ suficiente para que o elétron suba para o nível de energia acima da barreira interna do sistema (passo 3 da figura 4.1). Como este nível de energia está acima da barreira de potencial, o elétron tende a passar para o poço doador por estar carregado positivamente e por consequência do potencial coulombiano criado por este (passo 4 da figura 4.1). Quando o elétron faz essa passagem, tanto o doador como o receptor ficam neutros. Para finalizar este ciclo, o elétron então decai para o estado fundamental do poço de menor profundidade, retornando ao estado inicial.

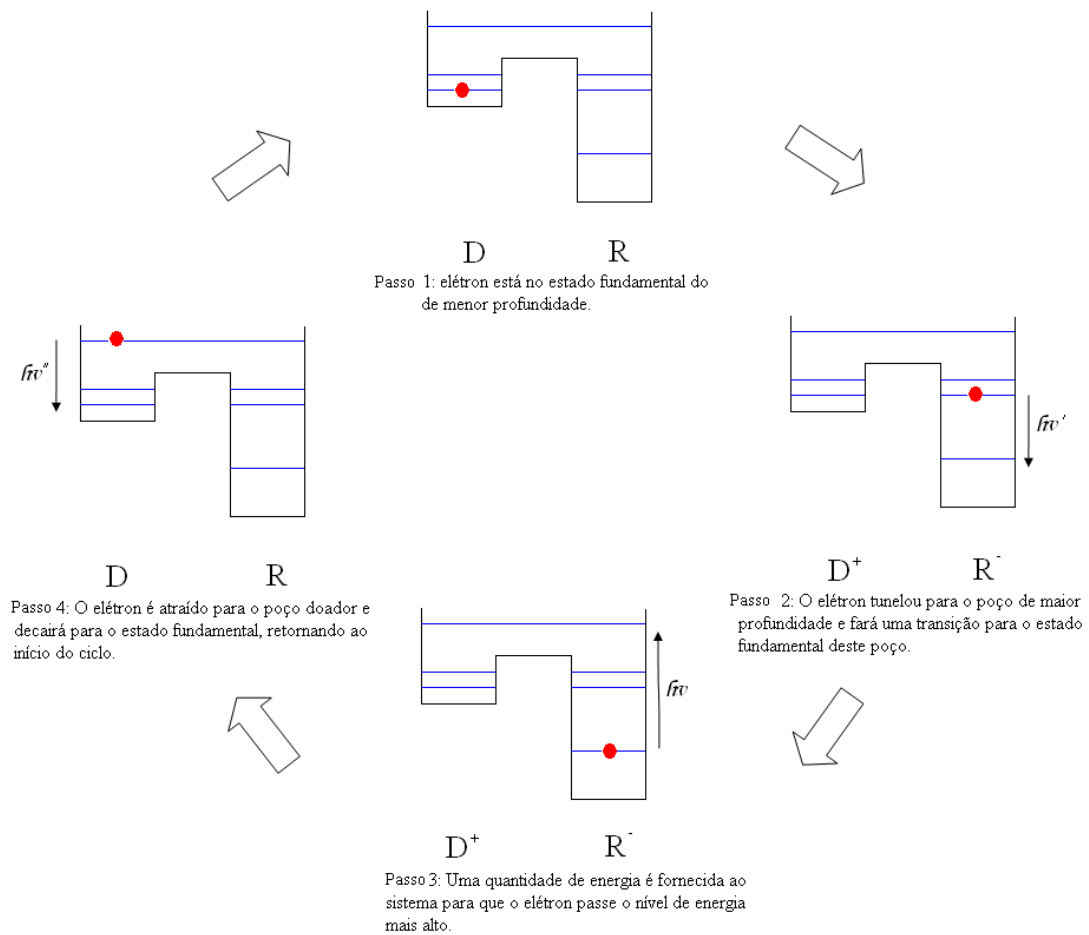


Figura 4.1- Diagrama do modelo proposto para transferência de elétrons. As linhas azuis representam os níveis de energia no PDQUA e o ponto vermelho simboliza a carga, neste caso, o elétron.

CAPÍTULO 5

EXEMPLOS NUMÉRICOS E O ESTUDO DE SISTEMAS BIOLÓGICOS CARACTERÍSTICOS

Neste capítulo são feitos alguns exemplos numéricos utilizando as equações transcendentais (3.20), (3.36) e (3.50) para determinar os autovalores de energia através do gráfico dessas equações em função da energia. Os autovalores são determinados pelo ponto de intersecção da curva plotada através da parte esquerda das equações transcendentais e outra curva da parte direita da equação. Esses gráficos se encontram no apêndice B deste trabalho.

Todos os exemplos aqui estudados são relacionados ao PDQUA ilustrado na figura 5.1, sendo que a largura a , a distância entre os poços L , o potencial V_0 e V_1 são variados em cada exemplo. Outros valores fixados foram $m = 9,109 \times 10^{-31}$ kg, que corresponde à massa do elétron, e $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ J.s que corresponde, como usual, à constante de Planck dividida por 2π .

Um poço duplo quadrado pode ser considerado como a junção de dois poços simples, no qual cada poço simples possui uma extremidade com uma barreira infinita e na outra um potencial finito (V_0). Caso os poços simples possuam as mesmas barreiras de potencial (V_0) e larguras o resultado da junção dos dois poços simples através da barreira consiste em um poço duplo simétrico. Por outro lado, se os poços simples possuam diferentes barreiras de potencial, V_0 e V_1 , por exemplo, então o resultado é o poço duplo assimétrico, conforme mostrado na figura 5.1. Nesta figura as linhas em azul representam os autovalores de energia para o poço simples e as linhas em vermelho representam os autovalores para o poço duplo. Para o poço simples de maior profundidade (V_1), E_0 representa o estado fundamental e E_1 representa o primeiro estado excitado. O nível de energia E_2 , localizado no poço de menor profundidade (V_0), foi determinado com a condição de ressonância, em que $E_1 = E_2$. Esta condição foi feita variando o valor de V_0 e das distâncias envolvidas no PDQUA. O estado fundamental do poço duplo está simbolizado por E_0^* , E_+ e E_- representam os estados ressonantes e E_3 é o primeiro nível acima da barreira de potencial.

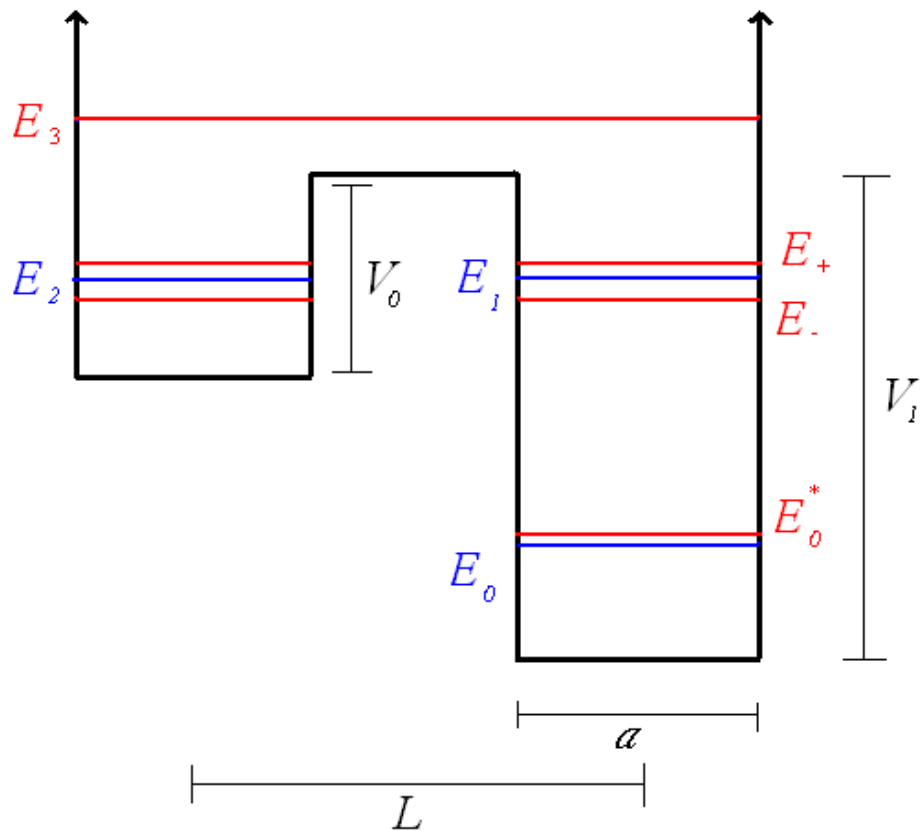


Figura 5.1 – Poço Duplo Quadrado Unidimensional Assimétrico com a identificação dos parâmetros utilizados. Os autovalores de energia indicados em vermelho correspondem aos autovalores do poço duplo. Os autovalores indicados em azul estão relacionados ao poço simples.

Com os autovalores de energia é possível calcular a taxa de tunelamento, (equação 2.93) expressa a partir da fórmula de Rabi (2.91), o tempo necessário para que o elétron possa decair para o estado fundamental no poço de maior profundidade, denominado tempo de transição eletrônica, pode ser estimado usando o Princípio da Incerteza como descrito na seção (3.4). O tempo característico de decaimento entre os níveis E_- e E_0^* é calculado pela expressão:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{2(E_- - E_0^*)} \quad (5.1)$$

A eficiência do ciclo representado na figura 4.1, também pode ser calculado através dos autovalores de energia utilizado a equação (4.1).

5.1 – Exemplo Numérico:

Neste primeiro exemplo os valores utilizados para parametrizar o PDQUA caracterizado na figura 5.1, foram: $V_1 = 130,62$ eV e $V_0 = 50$ eV. Cada poço possui o tamanho de 1 \AA separados por um distância de 2 \AA medida pelo centro de cada poço, ou seja, a barreira interna tem 1 \AA de largura. Os gráficos das equações transcendentais (3.20), (3.36) e (3.50) em função da energia correspondem aos gráficos B.1, B.2 e B.3, respectivamente na Apêndice B. Os gráficos da equação transcendental em função da energia para os poços V_1 e V_0 individuais também se encontram no apêndice B correspondendo aos gráficos B.4 e B.5. Os autovalores de energia para o poço duplo e para o poço simples obtidos neste exemplo se encontram na tabela 5.1

Poço Simples	Autovalores de energia em eV.	Poço Duplo	Autovalores de energia em eV.
E_0	27,126	E_0^*	27,162
E_1	102,750	E_+	104,089
E_2	102,804	E_-	101,635
		E_3	150,514

Tabela 5.1 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 130,62 eV e 50 eV de profundidade

Nesta tabela é possível notar que o autovalor de energia para o estado fundamental do poço individual V_1 (E_0) está próximo ao do estado fundamental do poço duplo (E_0^*), como o esperado, com um desvio de 0,133%. Analisando somente o poço simples, o nível de energia E_1 possui um desvio de 0,053% em relação a E_2 . No poço duplo, os autovalores de energia duplicados por consequência da ressonância estão um abaixo e outro acima dos níveis de energia originais, como o esperado. O cálculo de porcentagem é feito dividindo os autovalores de energia em questão, subtraído uma unidade e multiplicado o resultado por 100.

O tempo de tunelamento juntamente com o tempo de transição eletrônica foram calculados através dos autovalores de energia e seus valores se encontram na tabela 5.2.

TUNELAMENTO (s)	TRANSIÇÃO (s)
$8,429 \times 10^{-16}$	$4,422 \times 10^{-18}$

Tabela 5.2 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e também o porcentagem do rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 130,62$ eV e $V_0 = 50$ eV.

O tempo de transição eletrônica é duas ordens de grandeza menor que o tempo de tunelamento indicando que há uma probabilidade maior para o elétron sofrer uma transição.

Este caso é um bom exemplo para ilustrar os valores que podem ser utilizados em PDQUA, observando a ressonância, tunelamento e a transição. Procurando parâmetros para que o potencial seja próximo de um sistema real, um sistema fotossintético é estudado, como descrito na seção 5.2.

5.2 Sistema Biológico Característico

O tunelamento pode ser identificado em muitos sistemas, em particular em sistemas biológicos. Vários estudos foram feitos com o centro de reação (RC) de bactérias fotossintéticas. A *Rhodospseudomonas sphaeroides* [11,12] e *Rhodospseudomonas viridis* [13] são exemplos deste tipo de bactéria. Um esquema baseado em um dos artigos de *Feher* (vide referencia [14]) está ilustrado na figura 5.2, onde é mostrado uma reação de TE em bactérias fotossintéticas. Com a absorção de um fóton inicia-se a TE em uma serie de reações que são estabilizadas pela combinação de cargas opostas. Nesta figura também são evidenciados os tempos envolvidos na transferência em temperatura ambiente e a escala de energia em eV.

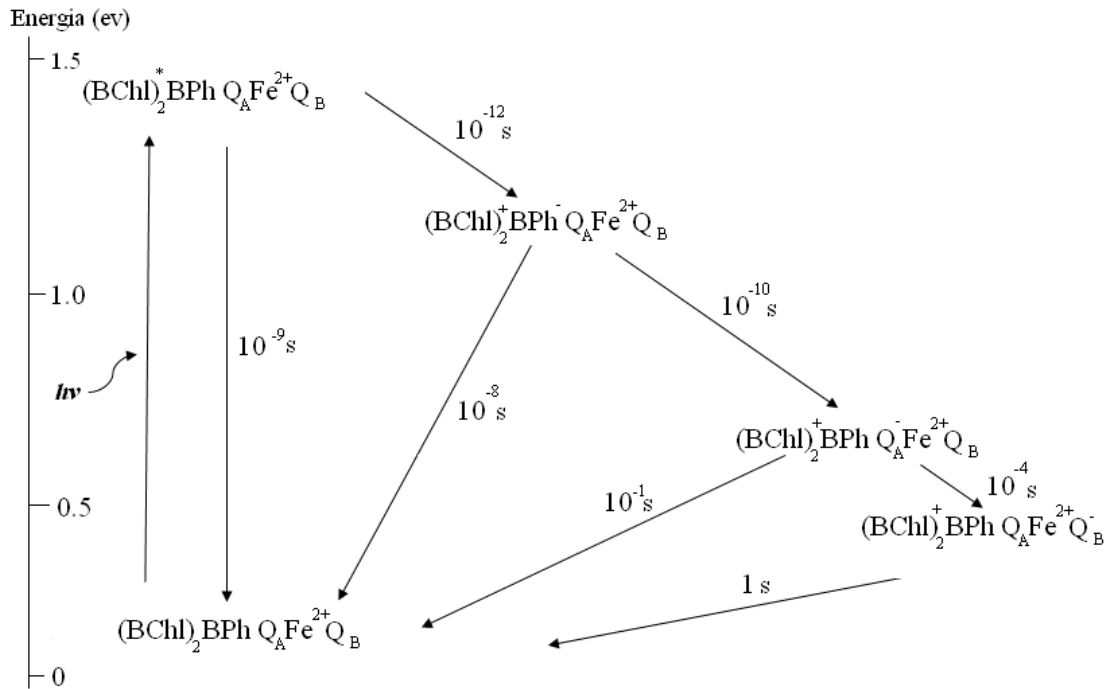


Figura 5.2 Reação de Transferência Eletrônica (vide referência 14). O doador primário é um dímero $(BChl)_2$, BPh é um aceitador intermediário, Q_a e Q_b são ubiquinonas que funcionam como aceptores primários e secundários e o Fe é um íon. Observando esta figura é possível verificar que o BPh é em aceitador primário, no entanto seu papel só foi descoberto depois dos outros aceptores.

Os centros de reação das transferências eletrônicas ocorrem a uma distância de 3 a 24 Å, em um período de pico segundos a segundos, possuindo uma energia livre de 1 a 30 kcal/mol [15], o que corresponde aproximadamente a 0,043 e 1,3 eV/ partícula, respectivamente.

Tendo uma estimativa das distâncias e da energia envolvida nesses processos biológicos com TE, é possível utilizar estes valores no PDQUA estudado.

Nos casos ressonantes a probabilidade de tunelamento é muito maior do que nos casos não ressonantes. Então para ter uma máxima eficiência no processo, tendo em vista que sistema envolvendo transferência eletrônica são eficientes, todos os casos estudados são ressonantes.

5.2.1 PDQUA: $V_1 = 0,99$ eV, $V_0 = 0,2$ eV, $L = 2$ nm e $a = 1$ nm

Tendo o cuidado de sempre ajustar os tamanhos envolvidos no PDQUA com o objetivo de obter estados ressonantes, o próximo exemplo numérico foi feito utilizando os seguintes valores para a barreira de potencial: $V_1 = 0,99$ eV e $V_0 = 0,2$ eV. O tamanho do poço e a distância entre eles também foi alterada de angstrom para nanômetro. Para este caso foi utilizado $L = 2$ nm e $a = 1$ nm. Todos os autovalores de energia se encontram na tabela 5.3, onde E_0 , E_1 e E_2 representam níveis de energia do poço simples e E_0^* , E_+ , E_- e E_3 representam níveis de energia do poço duplo. Os gráficos da equação transcendental em função da energia para as todas as regiões deste poço se encontram no apêndice B correspondendo aos gráficos B.6, B.7 e B.8, assim como os gráficos B.9 e B.10 que correspondem aos poços individuais para estes mesmos valores de potencial.

Poço Simples	Autovalores de energia em eV.	Poço Duplo	Autovalores de energia em eV.
E_0	0,25878	E_0^*	0,25877
E_1	0,93475	E_+	0,98895
E_2	0,94890	E_-	0,92023
		E_3	1,31159

Tabela 5.3 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 0,99 eV e 0,2 eV de profundidade

A tabela 5.3 está relacionada com a figura 5.1 e analisando seus dados é possível observar que o autovalor E_1 (poço maior) e E_2 (poço menor) possuem um desvio de 1,5%. Esses valores estão entre os autovalores E_+ e E_- , como o esperado. A explicação para este fato esta na previsão de Landau [10], na qual as funções resultantes da junção de dois poços simples podem ser aproximadas por combinações lineares das autofunções originais, dando origem a dois níveis de energia. O desvio entre o estado fundamental determinado no poço simples V_1 e no poço duplo é de 0,00366%, indicando uma diferença mínima entre eles.

Através dos autovalores de energia que se encontram na tabela 5.3 foi possível determinar o tempo de tunelamento e o tempo de transição baseado no Princípio da Incerteza. Todos esses valores para este poço de potencial estão expressos na tabela 5.4.

TUNELAMENTO (s)	TRANSIÇÃO (s)
$3,0103 \times 10^{-14}$	$4,978 \times 10^{-16}$

Tabela 5.4 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e também o porcentagem do rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 0,99 \text{ eV}$ e $V_0 = 0,2 \text{ eV}$.

O tempo de tunelamento é duas ordens de grandeza maior que o tempo de transição eletrônica, então a probabilidade do elétron sofrer uma transição é maior, devido seu menor tempo.

5.2.2 PDQUA: $V_1 = 1,5 \text{ eV}$, $V_0 = 0,675 \text{ eV}$, $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$

Neste exemplo os valores utilizados para o PDQUA mostrado na figura 5.1, foram: $V_1 = 1,5 \text{ eV}$ e $V_0 = 0,675 \text{ eV}$. O valor de V_0 foi determinado para que houvesse ressonância. Cada poço possui o tamanho de 1 nm separados por uma distância de 2 nm medida pelo centro de cada poço. Os gráficos da equação transcendental em função da energia para as todas as regiões deste poço correspondem aos gráficos B.11, B.12 e B.13, do apêndice B deste trabalho, sendo B.14 e B.15 os gráficos correspondentes os poços individuais para as mesmas profundidades usadas neste exemplo. Os autovalores de energia obtidos se encontram na tabela 5.5, onde os níveis de energia estão seguindo a representação da figura 5.1. O tempo de tunelamento e o de transição se encontram na tabela 5.6.

Poço Simples	Autovalores de energia em eV.	Poço Duplo	Autovalores de energia em eV.
E_0	0,27715	E_0^*	0,27739
E_1	1,06423	E_+	1,07098
E_2	1,06444	E_-	1,05741
		E_3	1,62600

Tabela 5.5 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 1,5 eV e 0,675 eV de profundidade e $L = 2 \text{ nm}$.

A diferença entre os níveis E_0^* (estado fundamental para o poço duplo) e E_0 (estado fundamental para o poço simples) foi de 0,0867% e o desvio entre E_1 e E_2 foi de 0,0197%. O nível E_3 está acima da barreira e os autovalores resultantes da ressonância (E_2 e E_3) estão um abaixo e outro acima dos níveis de energia originais, como o esperado.

TUNELAMENTO (s)	TRANSIÇÃO (s)
$1,5241 \times 10^{-13}$	$4,2214 \times 10^{-16}$

Tabela 5.6 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e também o percentagem do rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 1,5$ eV e $V_0 = 0,675$ eV, de profundidade e $L = 2$ nm.

Os tempos envolvidos neste exemplo possuem uma diferença de três ordens de grandeza, então o elétron tem uma probabilidade maior de sofrer transição, pois o tempo é menor.

5.2.3 PDQA: $V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2,8$ nm e $a = 1$ nm

O objetivo deste último exemplo é obter um valor de tempo de tunelamento eletrônico da ordem de pico segundos para aproximar ainda mais dos sistemas biológicos. Para isso foi necessário variar a distância entre os poços para que a diferença de energia entre os novos autovalores de energia ($E_+ - E_-$) fosse aumentada resultando em um tempo de tunelamento maior que o exemplo anterior. Por tanto o melhor valor para a distância entre os poços foi de 2,8 nm, sendo os outros parâmetros mantidos com os mesmos valores do exemplo anterior ($V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV e $a = 1$ nm). Os gráficos da equação transcendental em função da energia para todas as regiões deste poço correspondem aos gráficos B.16, B.17 e B.18, que se encontram no apêndice B deste trabalho. Os gráficos para o poço simples é igual ao exemplo anterior, correspondentes aos gráficos B.14 e B.15. Os autovalores de energia obtidos se encontram na tabela 5.7, onde E_0, E_1 e E_2 representam níveis de energia do poço simples e E_0^*, E_+, E_- e E_3 representam níveis de energia do poço duplo.

Poço Simples	Autovalores de energia em eV.	Poço Duplo	Autovalores de energia em eV.
E_0	0,27715	E_0^*	0,27740
E_1	1,06423	E_+	1,06448
E_2	1,06444	E_-	1,06355
		E_3	1,56556

Tabela 5.7 Autovalores de energia em eV para o PDQUA com 1,5eV e 0,675eV de profundidade e $L = 2,8$ nm.

Os dados da tabela 5.7 mostram que a diferença entre os níveis E_0^* e E_0 foi de 0,09%, maior que a do exemplo 5.2.3 e o desvio entre E_1 e E_2 é o mesmo do exemplo anterior, já que a única diferença é a distância entre os poços e por tanto os valores relacionados ao poço simples não mudam.

TUNELAMENTO (s)	TRANSIÇÃO (s)
$2,2133 \times 10^{-12}$	$4,1885 \times 10^{-16}$

Tabela 5.8 Valores em segundos para o tempo de tunelamento, tempo de transição e também o percentagem do rendimento do ciclo para o poço com $V_1 = 1,5$ eV e $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2,8$ nm.

Neste último exemplo o tempo de tunelamento é de $2,2133 \times 10^{-12}$ s e o tempo de transição eletrônica é de $4,1885 \times 10^{-16}$ s., como mostrado na tabela 5.8. Analisando estes tempos é possível concluir, neste caso, que o elétron terá uma probabilidade muito maior em decair para o estado fundamental do poço de maior profundidade do que tunelar novamente para o poço de menor profundidade, devido ao tempo de transição eletrônica ser quatro ordens de grandeza menor que o tempo de tunelamento. Este tempo de pico segundos pode ser encontrado na figura 5.2. Nesta figura os tempos envolvidos podem ser caracterizados com tempos de tunelamento já que o tempo de transição é menor do que o de tunelamento.

5.3 Estudo das funções de ondas envolvidas no modelo proposto

Para ilustrar melhor as funções de onda contidas no PDQUA, foi feito nesta secção gráficos das funções de onda ressonantes e da função de onda correspondente ao primeiro estado acima da barreira de potencial, tendo como referência os dados do exemplo 5.2.3 ($V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV, $L = 2,8$ nm e $a = 1$ nm). A figura 5.3 mostra o comportamento da função de onda para o primeiro estado excitado, no qual é possível verificar um nó na região em que o poço é mais profundo, linha laranja. A região vermelha é referente ao poço de menor profundidade e a linha azul corresponde a região da barreira de potencial.

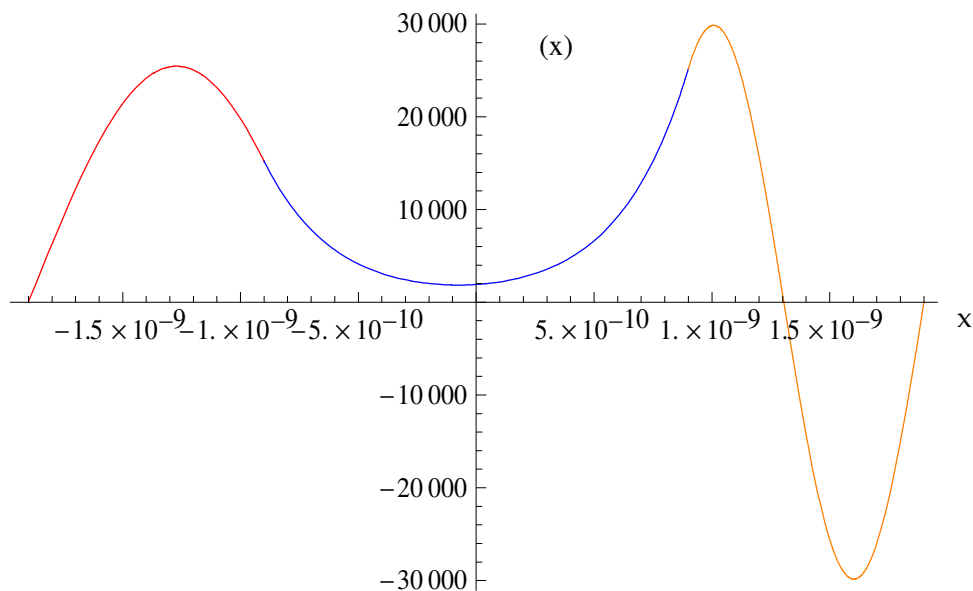


Figura 5.3 Função de onda para o primeiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x). O eixo das ordenadas está exatamente no meio do poço. A linha vermelha representa a equação (3.22), a azul a equação (3.23) e a laranja a equação (3.24).

Na figura 5.4 é ilustrado a função de onda para o segundo estado excitado. Dois nós são obtidos, um na região do poço mais profundo (linha laranja) e outro na região da barreira (linha azul), exatamente no meio do poço duplo.

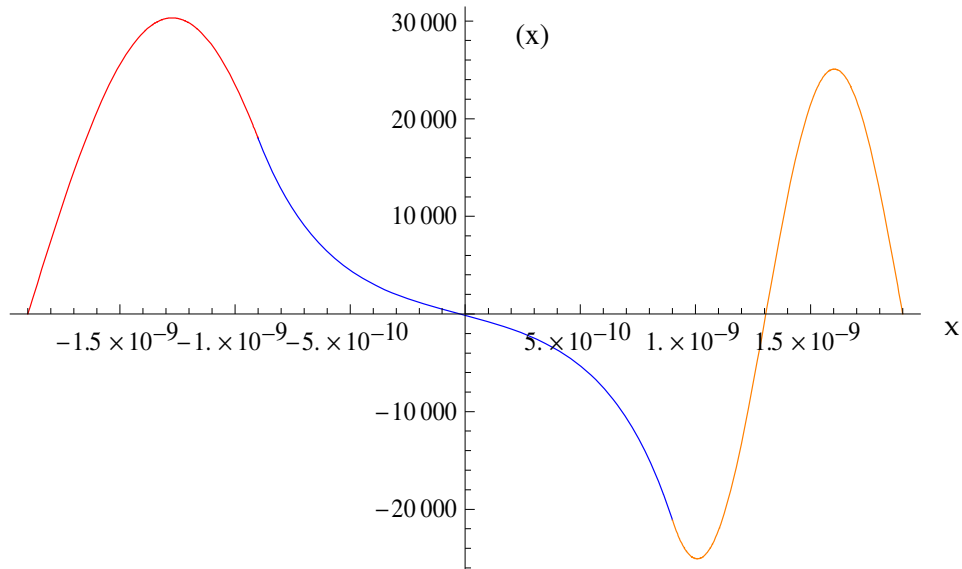


Figura 5.4 Função de onda para o segundo estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x). A linha vermelha representa a equação (3.22), a azul a equação (3.23) e a linha laranja a equação (3.24).

O primeiro nível acima da barreira de potencial, terceiro estado excitado, é ilustrado na figura 5.5, no qual três nós são evidenciados. O eixo vertical está representando exatamente o meio do PDQUA, verificando que a função de onda está mais distribuída no lado esquerdo do poço, pertencente ao poço de menor profundidade.

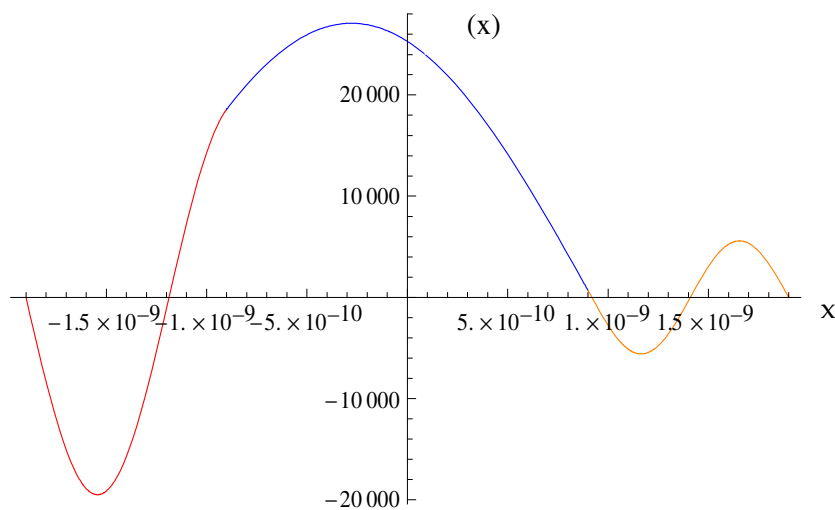


Figura 5.5 Função de onda para o terceiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x). A linha vermelha representa a equação (3.38), a azul a equação (3.39) e a linha laranja a equação (3.40).

A distribuição da probabilidade para a função de onda do primeiro nível acima da barreira é mostrada na figura 5.6.

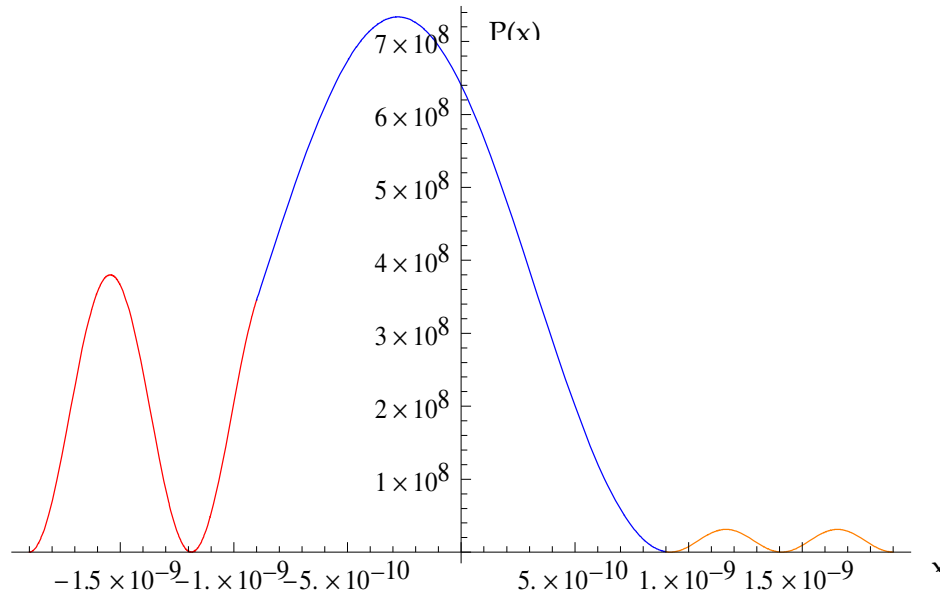


Figura 5.6 Distribuição da probabilidade da função de onda para o terceiro estado excitado em função da localização dentro do poço duplo (x). A linha vermelha representa a probabilidade de encontrar o elétron no poço de menor profundidade, a linha azul a probabilidade de encontrar o elétron na região acima da barreira de potencial e a linha laranja a probabilidade de encontrar o elétron no poço de maior profundidade.

Na figura 5.6 a distribuição da probabilidade da função de onda para os níveis de energia acima da barreira de potencial em vermelho simbolizam a região correspondente ao poço de menor profundidade, a azul representa a região em cima da barreira de potencial e a laranja simboliza a região correspondente ao poço de maior profundidade. A distribuição da probabilidade tem maior amplitude no poço de menor profundidade (vermelho) do que no poço de maior profundidade (laranja), evidenciando que quando o elétron está no primeiro estado acima da barreira de potencial, há uma probabilidade maior de encontrá-lo no poço menor do que no poço maior. Este fato está relacionado com o modelo proposto que pode ser encontrado no Capítulo 4.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Transferência eletrônica é uma reação muito importante em vários sistemas químicos e biológicos essenciais para a vida dos seres vivos. Muitos exemplos podem ser citados neste tipo de reação, dentre eles, a fosforilação oxidativa e a fotossíntese, no qual o elétron é transportado ao longo de uma cadeia [11].

No capítulo 2 deste trabalho foi resolvido o PDQUS através da Equação de Schrödinger independente do tempo encontrando equações transcendentais que possibilita determinar os autovalores de energia [8]. Como todos os PDQUS são ressonantes, neste mesmo capítulo foi determinado o tempo de tunelamento a partir da Fórmula da Rabi [7], este tempo também pode ser aplicado em PDQUA ressonantes. A solução para essa última geometria de poço pode ser encontrada na capítulo 3, onde são mostradas as equações transcendentais para todas as regiões deste poço. Para verificar a consistência da solução para o PDQUA foi feita, uma aproximação desse tipo de sistema para o PDQUS, onde pode ser observada a consistência do resultado obtido. Como este poço duplo possui na sua forma um poço com maior profundidade, um elétron que se encontre no nível ressonante de menor energia no poço de maior profundidade tenderá a decair para o estado fundamental deste poço. O tempo de transição eletrônica encontrado neste capítulo foi estimado através do Princípio da Incerteza da Heisenberg. Um possível modelo para a transferência eletrônica utilizando o PDQUA é mostrado no capítulo 4. No capítulo 5 é possível verificar os autovalores obtidos para alguns exemplo do PDQUA, variando suas profundidades e seus tamanhos. O tempo de tunelamento e transição eletrônica e o rendimento de cada ciclo são expressos neste capítulo. No primeiro exemplo um valor inicial é dado ao potencial em eV e também para o tamanho dos poços e a distância entre eles. Verificando não ser próximo os valores relacionados a sistemas biológicos, os valores de potenciais foram diminuídos e seus tamanhos e distâncias aumentadas. Em todos estes exemplos o objetivo foi alcançado: obter um tempo de tunelamento menor do que o tempo de transição eletrônica, permitindo que o elétron decaia, garantindo então o modelo proposto na capítulo 4. No exemplo 5.2.2 os valores dos parâmetros no PDQUA foram $V_1 = 1,5$ eV, $V_0 = 0,675$ eV. $L = 2$ nm e $a = 1$ nm.

Com esses valores foram obtidos os autovalores de energia que se encontram na tabela 5.5. Com os autovalores foi possível determinar o tempo de tunelamento de $1,5241 \times 10^{-13}$ s, tempo de transição eletrônica de $8,4428 \times 10^{-16}$ s e o rendimento do ciclo de 57,8%. Como o tempo de transição eletrônica é três ordens de grandeza menor que o de tunelamento, então o elétron tem uma probabilidade maior para decair do que tunelar novamente para o outro poço, realizando então uma TE em cadeia fechada. Com a intenção de obter um tempo de tunelamento menor, para uma aproximação maior com sistemas biológicos fotossintéticos, verificou-se que aumentando a distância entre os poços e mantendo todos os outros parâmetros iguais, torna-se possível um tempo de tunelamento menor, aumentando a diferença entre os dois tempos envolvidos. Isso foi testado no exemplo 5.2.3, mudando de $L = 2$ nm para $L = 2,8$ nm. Os novos autovalores de energia se encontram na tabela 5.7. Vale destacar que o tempo de tunelamento aumentou uma ordem de grandeza passando então para o valor de $2,213 \times 10^{-12}$ s, o tempo de transição quase não variou ($8,3769 \times 10^{-16}$ s). Por tanto o elétron terá uma probabilidade maior em decair para o estado fundamental do que para tunelar.

O objetivo deste trabalho foi portanto alcançado, sendo o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico completamente resolvido, demonstrando através de exemplos, os autovalores de energia que podem ser obtidos dependendo dos valores utilizados para os parâmetros. Com estes autovalores foi possível obter grandezas físicas, como o tempo de tunelamento e o tempo de transição eletrônica. Esses resultados colaboram com o modelo proposto e, em particular, quando usados parâmetros inspirados em sistemas biológicos, os tempos obtidos estão próximos aos medidos experimentalmente.

Referências Bibliográficas

- [1] Barbara, P. F.; Meyer, T. J.; Ratner, M. A.; J. Phys. Chem.; 100; 13148, 1996.
- [2] Chance, B.; Nishimura, M.; Proc. Natn. Acad. Sci. U.S.A. 46, 19-24, 1960.
- [3] DeVault, D. & Chance, B. Biophys. J. 6, 825-847, 1966.
- [4] DeVault, D., Quantum Mechanical Tunneling in Biological systems, Cambridge University Press (1983).
- [5] Marcus, R. A.; Sutin, N.; Biochim. Biophys. Acta; 811, 265-322, 1985
- [6] Kittel, C., Introdução à física do estado sólido, Rio de Janeiro: LTC, Ed. 8, 2006.
- [7] Cohen-Tannoudji, C., Diu and B.. Laloë, F., Quantum Mechanics, vol.1, New York: John Wiley & Sons; Paris: Hermann (1977).
- [8] Greiner, W., Quantum Mechanics: na introduction, New York, Springer-Verlag Press (2001).
- [9] Eisberg, R. e Resnick, R., Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas, Rio de Janeiro, Editora Campus (1979).
- [10] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M., Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory, Oxford, Pergamon (1977).
- [11] Onuchic, J. N. Tese Ph. D., Californis Institute of Technology, 1987.
- [12] Allen J. P. et al, Structure of the reaction Center from Rhodobacter sphaeroides R-26: The cofactors^{*}, Biophysics, vol. 84, 5730-5734, 1987.
- [13] Dutton, P. L., Mosser, C. C., Quantum Biomechanics of long-range electron transfer in protein: Hydrogen bonds and reorganization energies, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 91, 10274-10250, 1944.
- [14] Feher, G., et al, Structure and function of bacterial photosynthetic reaction centres, Nature, 339, 111-116.
- [15] Moser, C. C., Keske, J. M., Warncke, K., Farid, R. S. & Dutton, P. L. Nature (London) 355, 796-802.

APÊNDICE A

DIAGONALIZAÇÃO DE UMA MATRIZ HERMITIANA 2X2

Neste apêndice será apresentado em detalhes uma das formas de diagonalizar a matriz hermitiana (H).

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

A matriz Hermitiana (H) pode ser reescrita, como a soma de outras duas matrizes da seguinte forma:

$$(H) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}) & W_{12} \\ W_{21} & -\frac{1}{2}(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

O primeiro fator da soma é uma matriz diagonal, podendo escrever o operador H como:

$$H = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \mathbf{1} + \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}) K, \quad (\text{A.3})$$

onde $\mathbf{1}$ é um operador identidade e K é um operador Hermitiano representado na base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ pela matriz:

$$(K) = \begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Relacionando os autovalores $|\psi_{\pm}\rangle$ com os autovalores correspondentes à H e K , tem-se:

$$H|\psi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle, \quad (\text{A.5})$$

$$K|\psi_{\pm}\rangle = k_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle, \quad (\text{A.6})$$

logo, de (A.3) obtém-se:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})k_{\pm}. \quad (\text{A.7})$$

Para determinar os autovalores de K (k_{\pm}) aplica-se o determinante característico na matriz (K):

$$\det(K - kI) = \det \left[\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -k & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix} \right] = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$k^2 - 1 - \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2} = 0 \quad (\text{A.9})$$

Resolvendo a equação acima tem-se os seguintes autovalores de (K):

$$k_+ = \frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}}, \quad (\text{A.10})$$

$$k_- = -\frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}}. \quad (\text{A.11})$$

Com os autovalores de K obtém-se os autovalores de H através da equação(A.7):

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2}, \quad (\text{A.12})$$

$$E_- = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \frac{1}{2}\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2}. \quad (\text{A.13})$$

Encontrado os autovalores de H , o próximo passo é encontrar os autovetores de H .

O autovetor $|\psi_+\rangle$ é escrito como combinação linear dos vetores da base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$. Sendo a e b os componentes do autovetor $|\psi_+\rangle$ em $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, tem-se:

$$|\psi_+\rangle = a |\varphi_1\rangle + b |\varphi_2\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Pela condição de normalização:

$$\langle \psi_+ | \psi_+ \rangle = 1, \quad (\text{A.15})$$

Pode-se determinar a relação entre os componentes a e b :

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (\text{A.16})$$

De acordo com as equações (A.4), (A.6) e (A.10), tem-se:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

Assumindo a matriz (W) puramente não diagonal. Isto é, $W_{11} = W_{22} = 0$, a equação acima torna-se:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 - E_2} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 - E_2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Fazendo a multiplicação de matrizes, chega-se:

$$\begin{pmatrix} a + \frac{2W_{12}}{E_1 - E_2}b \\ \frac{2W_{21}a}{E_1 - E_2} - b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2}a \\ \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2}b \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

As duas equações resultantes da expressão (A.19) são linearmente independentes. Então de uma das equações da expressão (A.19),

$$\left(1 - \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2}\right)a + \frac{2W_{12}}{E_1 - E_2}b = 0, \quad (\text{A.20})$$

e das expressões (A.14) e (A.16), tem-se:

$$|\Psi_+\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\varphi_2\rangle. \quad (\text{A.21})$$

O mesmo procedimento pode ser feito para determinar o autovetor $|\Psi_-\rangle$ em função de $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$. Sendo:

$$|\Psi_-\rangle = c|\varphi_1\rangle + d|\varphi_2\rangle, \quad (\text{A.22})$$

e considerando as equações (A.4), (A.6) e (A.11), tem-se:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Como a matriz é puramente não diagonal, isto é, $W_{11} = W_{22} = 0$, a relação (A.23) torna-se:

$$\frac{2W_{12}}{E_1 - E_2} c + \left(-1 + \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2} \right) d = 0, \quad (\text{A.24})$$

Com a expressão acima (A.24) e a condição de normalização $|c|^2 + |d|^2 = 1$, obtém-se o autovetor, ou seja:

$$\begin{aligned} |\Psi_-\rangle = & -\sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\varphi_1\rangle \\ & + \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\varphi_2\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

A seguir, pode-se determinar os autoestados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, utilizando a inversão dos autovetores $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$.

Multiplicando a equação (A.21) por:

$$\sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right], \quad (\text{A.26})$$

e a equação (A.25) por:

$$-\sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]. \quad (\text{A.27})$$

e somando-as obtém-se:

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle = & \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\Psi_+\rangle \\ & - \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] |\Psi_-\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

O mesmo pode ser feito para determinar $|\varphi_2\rangle$, multiplicando a equação (A.21) por:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]}, \quad (\text{A.29})$$

e a equação (A.25) por:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]}. \quad (\text{A.30})$$

e somando-as, obtém-se:

$$\begin{aligned} |\varphi_2\rangle = & \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_+\rangle \\ & + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_-\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

APÊNDICE B

GRÁFICOS DAS EQUAÇÕES TRANSCENDENTAIS EM FUNÇÃO DA ENERGIA

Neste apêndice serão mostrados todos os gráficos das equações transcendentais (3.20), (3.36) e (3.50) em função da energia, plotados em todas as regiões do poço. Os gráficos B.1, B.6, B.11 e B.16, são relacionados a energia do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$ correspondente a equação (3.20), os gráficos B.2, B.7, B.12 e B.17 correspondem energia entre os dois mínimos de potencial (equação 3.36) e os gráficos B.3, B.8, B.13 e B.18 correspondem a energia acima da barreira de potencial (equação 3.50). Estes gráficos foram plotados para todos os valores de potenciais feitos neste trabalho, sendo que, o autovalor de energia é determinado pelo ponto de intersecção entre as curvas. Além destes gráficos também é mostrado neste apêndice os gráficos do poço simples para os mesmos valores de potencial, determinando os níveis de energia correspondentes. A equação transcendental que descreve o poço simples é:

$$-\sqrt{\frac{(V_0 - E)}{E}} = \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right),$$

sendo $m = 9,109 \times 10^{-31}$ kg, que corresponde à massa do elétron, e $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ J.s que corresponde, como usual, à constante de Planck dividida por 2π .

Os gráficos B.4, B.9, B.14, correspondem ao poço simples de menor profundidade e os gráficos B.5, B.10 e B.15, correspondem ao poço simples de maior profundidade.

B.1 PDQUA: $V_1 = 130,62$ eV, $V_0 = 50$ eV, $L = 2$ Å e $a = 1$ Å

No primeiro exemplo os valores utilizados para os potenciais foram: $V_1 = 130,62$ eV ($2,0925 \times 10^{-17}$ J) e $V_0 = 50$ eV ($8,01 \times 10^{-18}$ J). O tamanho do poço (a) foi de 1 Å e a distância (L) entre os dois poços foi de 2 Å. Os autovalores de energia encontrado no gráfico B.1 pelo ponto de intersecção foi de $4,3495 \times 10^{-18}$ J. No gráfico B.2 foram encontrados dois níveis de energia: $1,629 \times 10^{-17}$ J e $1,668 \times 10^{-17}$ J, correspondendo os níveis ressonantes. O gráfico B.3 possui infinitos níveis de energia, do qual só será identificado o primeiro nível acima da barreira da potencial como valor de $2,4112 \times 10^{-17}$ J.

B.1.1 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Duplo

$$- \frac{[(k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)} + (k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)}]e^{\beta(L-a)}}{[-(k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)} - (k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)}]} \quad - \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)]e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}$$

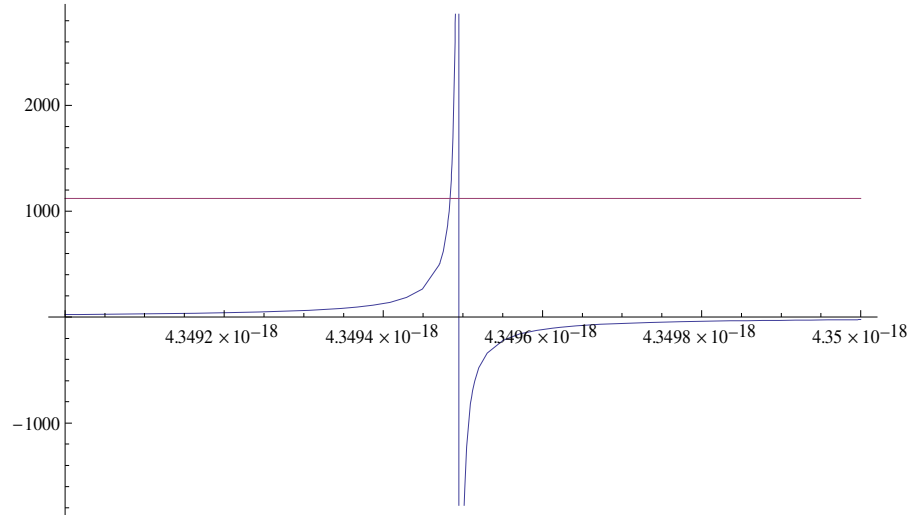


Gráfico B.1 Equação transc. do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$ em função da energia para: $V_1 = 130,62 \text{ eV}$ ($2.0925 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 50 \text{ eV}$ ($8.01 \times 10^{-18} \text{ J}$), $L = 2 \text{ \AA}$ e $a = 1 \text{ \AA}$.

$$- \frac{[\beta + k_1 \cot(k_1 a)]e^{\beta(L-a)}}{[\beta - k_1 \cot(k_1 a)]} \quad - \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)]e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}$$

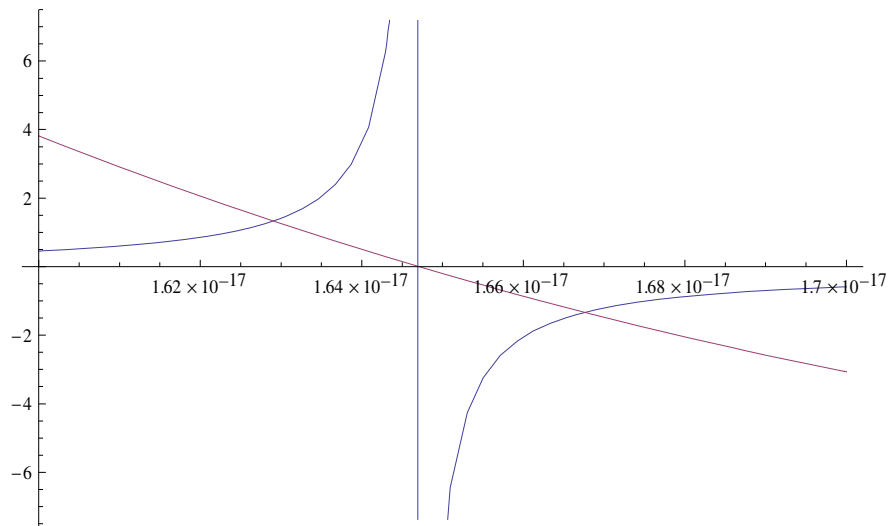


Gráfico B.2 Equação transc. entre os dois mínimos de potencial em função da energia para: $V_1 = 130,62 \text{ eV}$ ($2.0925 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 50 \text{ eV}$ ($8.01 \times 10^{-18} \text{ J}$), $L = 2 \text{ \AA}$ e $a = 1 \text{ \AA}$.

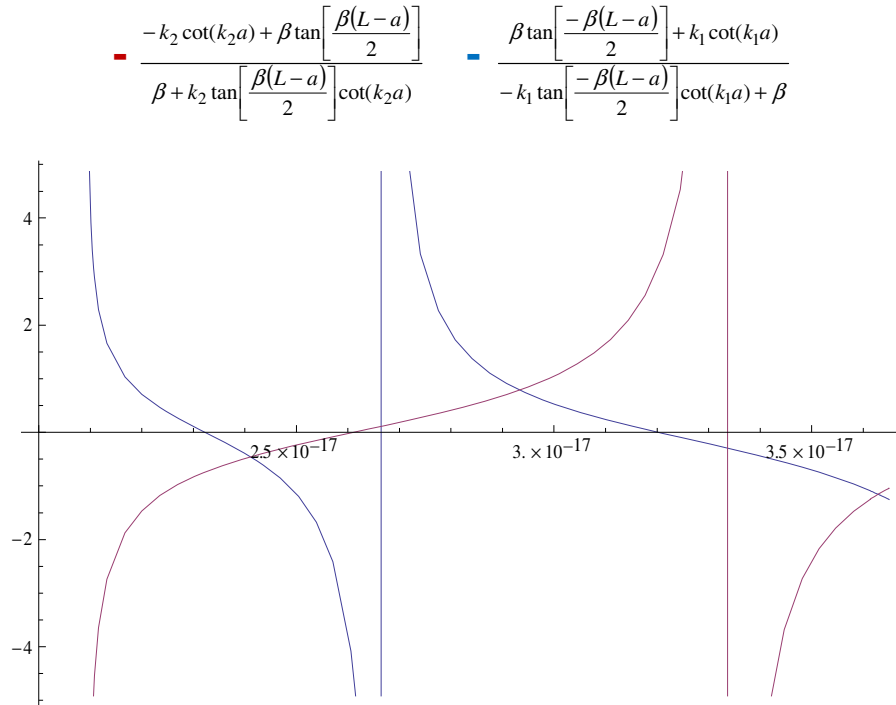


Gráfico B.3 Equação transc. acima da barreira de potencial em função da energia para: $V_1 = 130,62 \text{ eV}$ ($2.0925 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 50 \text{ eV}$ ($8.01 \times 10^{-18} \text{ J}$), $L = 2 \text{ \AA}$ e $a = 1 \text{ \AA}$.

Para o gráfico B.4 foi encontrado o autovalor de energia de $3.539 \times 10^{-18} \text{ J}$, mas é necessário somar a diferença de energia entre os dois poços, ou seja, $(V_1 - V_0) = 1.2915 \times 10^{-17} \text{ J}$, resultando em $1.6454 \times 10^{-17} \text{ J}$.

B.1.2 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Simples

$$-\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad \text{---} \quad \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right)$$

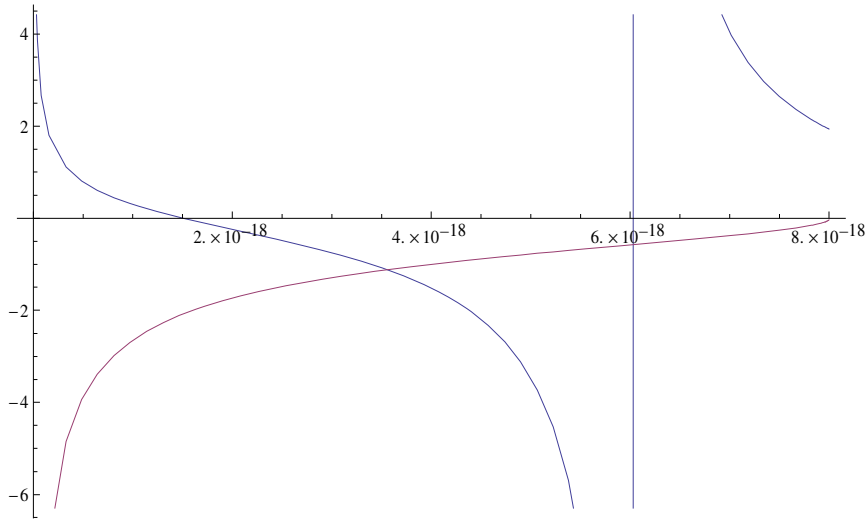


Gráfico B.4 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 50 \text{ eV}$ ($8.01 \times 10^{-18} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ \AA}$.

Já no gráfico B.5 foram encontrados os seguintes valores para os níveis de energia:

$4.353 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $1.648 \times 10^{-18} \text{ J}$.

$$-\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad \text{---} \quad \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right)$$

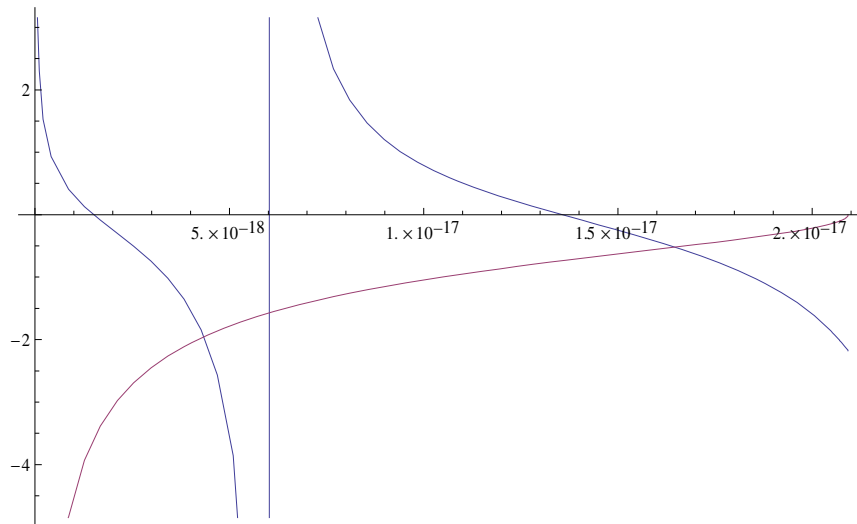


Gráfico B.5 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 130,62 \text{ eV}$ ($2.0925 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ \AA}$.

B.2 PDQUA: $V_1 = 0,99 \text{ eV}$, $V_0 = 0,2 \text{ eV}$, $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$

No segundo exemplo os valores utilizados para os potenciais foram: $V_1 = 0.99 \text{ eV}$ ($1.586 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 0.2 \text{ eV}$ ($3.204 \times 10^{-18} \text{ J}$). O tamanho do poço (a) foi de 1nm (nanômetro) e a distância (L) entre os dois poços foi de 2nm. No gráfico B.6 o ponto de intersecção corresponde ao autovalor de energia de $4.14566 \times 10^{-20} \text{ J}$. Já no gráfico B.7 os autovalores de energia encontrados foram: $1.4742 \times 10^{-19} \text{ J}$ e $1.5843 \times 10^{-19} \text{ J}$.

B.2.1 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Duplo

$$- \frac{[(k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)} + (k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)}]e^{\beta(L-a)}}{[-(k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)} - (k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)}]} = \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)]e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}$$

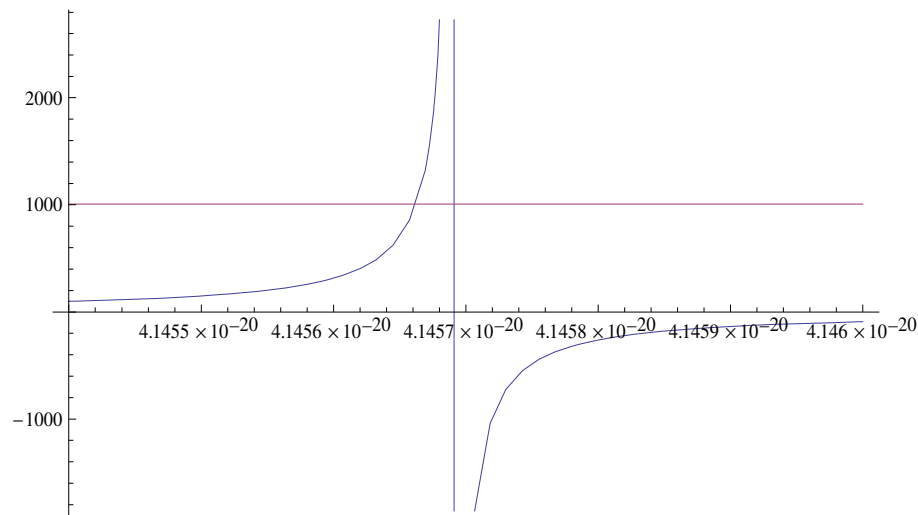


Gráfico B.6 Equação transc. do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$ em função da energia para: $V_1 = 0.99 \text{ eV}$ ($1.586 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 0.2 \text{ eV}$ ($3.204 \times 10^{-18} \text{ J}$), $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$

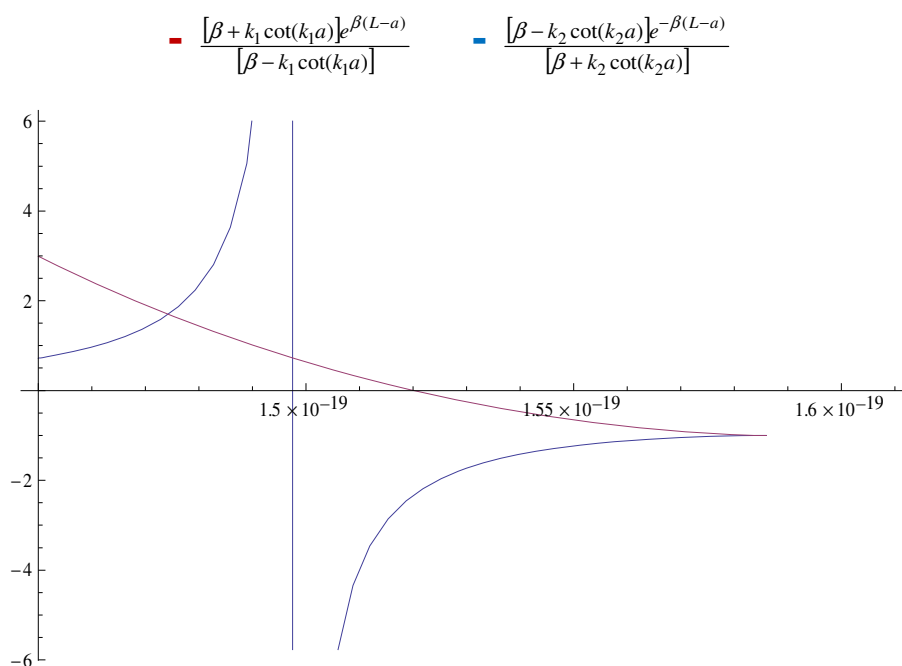


Gráfico B.7 Equação transc. entre os dois mínimos de potencial em função da energia para:
 $V_1 = 0.99 \text{ eV} (1.586 \times 10^{-17} \text{ J})$ e $V_0 = 0.2 \text{ eV} (3.204 \times 10^{-18} \text{ J})$, $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

O gráfico B.8 possui infinitos níveis de energia, sendo o primeiro deles igual a $2.1012 \times 10^{-19} \text{ J}$.

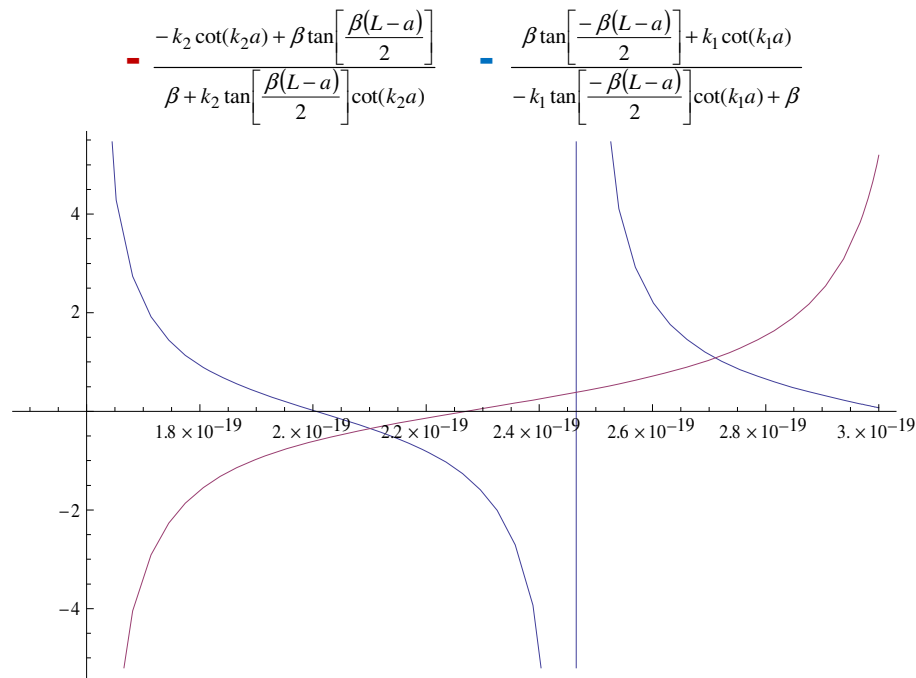


Gráfico B.8 Equação transc. acima da barreira de potencial em função da energia para: $V_1 = 0.99 \text{ eV}$ ($1.586 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $V_0 = 0.2 \text{ eV}$ ($3.204 \times 10^{-18} \text{ J}$), $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

Para os poços simples de mesmo potencial utilizado neste exemplo forma encontrados para o poço de menor profundidade um autovalor de energia $2.5456 \times 10^{-20} \text{ J}$ (gráfico B.9). Como este poço não está no mesmo eixo do poço de maior profundidade é necessário somar a diferença das duas profundidades, ou seja, $1.2656 \times 10^{-19} \text{ J}$, tendo como resultado o autovalor de energia de $1.5201 \times 10^{-19} \text{ J}$. Este valor pode ser comparado ao autovalor do poço de maior profundidade, $1.5 \times 10^{-19} \text{ J}$ (gráfico B.10) chegando ao caso ressonante. O poço de maior profundidade ainda possui um estado fundamental no valor de $4.145 \times 10^{-20} \text{ J}$.

B.2.2 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Simples

$$- \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad \text{---} \quad \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a\right)$$

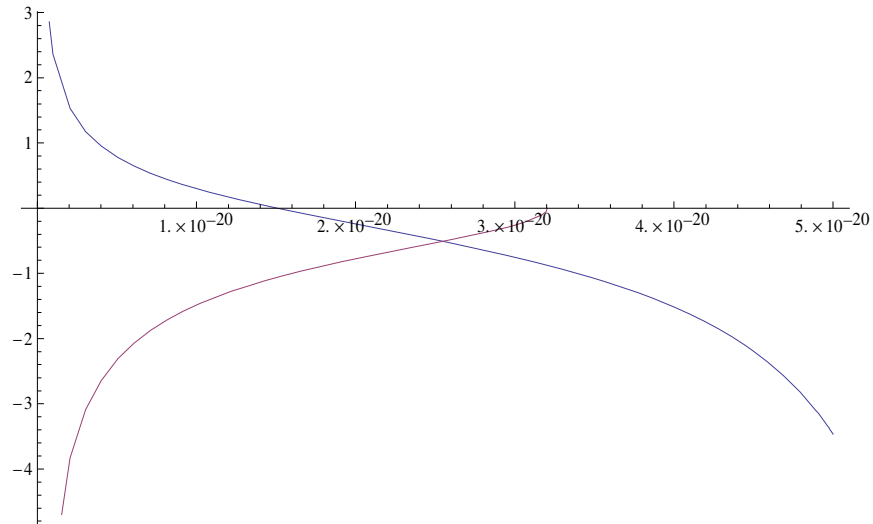


Gráfico B.9 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 0.2 \text{ eV}$ ($3.204 \times 10^{-18} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ nm}$.

$$- \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad \text{---} \quad \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a\right)$$

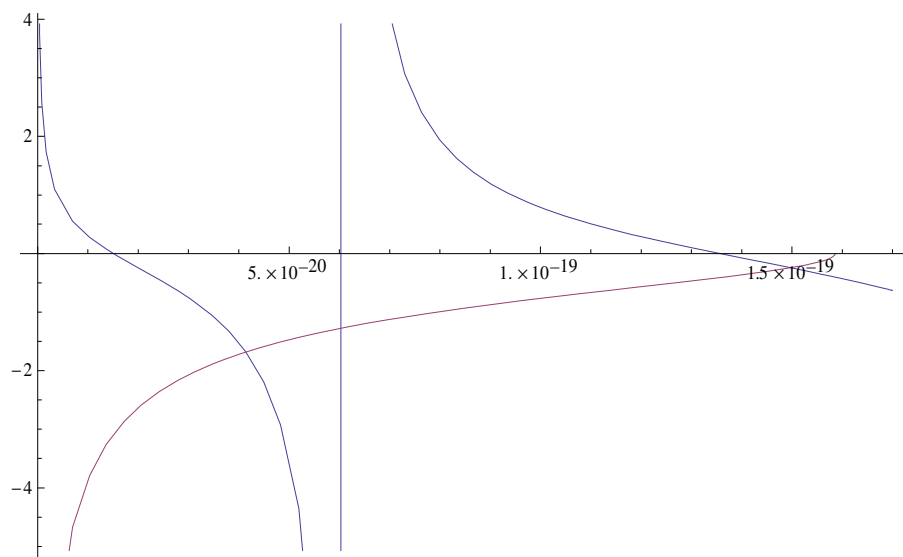


Gráfico B.10 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 0.99 \text{ eV}$ ($1.586 \times 10^{-17} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ nm}$.

B.3 PDQUA: $V_1 = 1,5 \text{ eV}$, $V_0 = 0,675 \text{ eV}$, $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$

No terceiro exemplo os valores utilizados para os potenciais foram: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$). O tamanho do poço (a) foi de 1nm (nanômetro) e a distância (L) entre os dois poços foi de 2nm. No gráfico B.16 foi encontrado um autovalor de energia de $4.44408 \times 10^{-20} \text{ J}$. Para o gráfico B.17, foram encontrados os valores de $1.6939 \times 10^{-19} \text{ J}$ e $1.7157 \times 10^{-19} \text{ J}$, correspondendo aos níveis ressoantes. Acima da barreira de potencial são encontrados infinitos níveis de energia, sendo o primeiro nível $2.605 \times 10^{-19} \text{ J}$ ilustrado no gráfico B.18.

B.3.1 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Duplo

$$- \frac{[(k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)} + (k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)}]e^{\beta(L-a)}}{[-(k_1 + \beta)e^{k_1(L+a)} - (k_1 - \beta)e^{k_1(L-a)}]} = \frac{[\beta - k_2 \cot(k_2 a)]e^{-\beta(L-a)}}{[\beta + k_2 \cot(k_2 a)]}$$

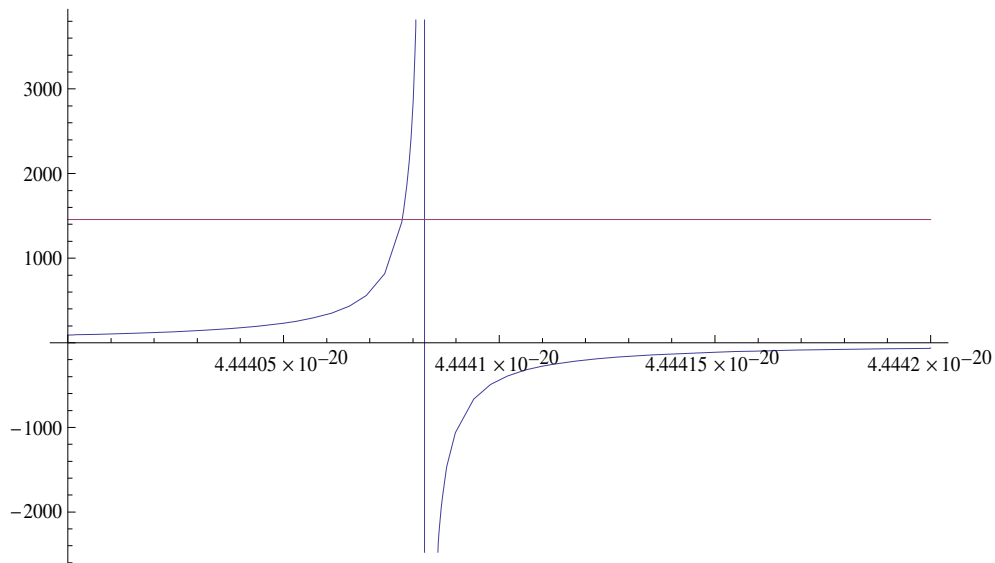


Gráfico B.11 Equação transc. do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$ em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

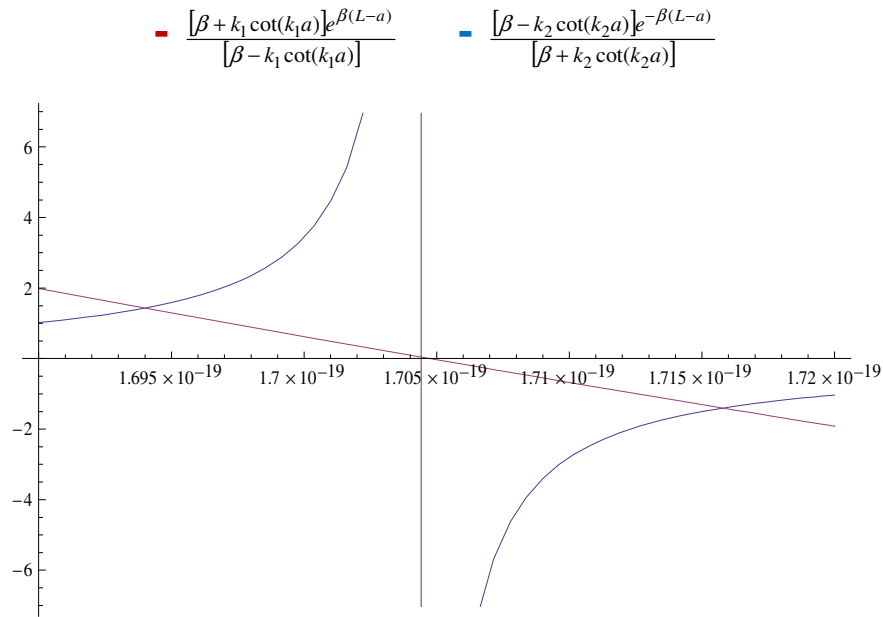


Gráfico B.12 Equação transc. entre os dois mínimos de potencial em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

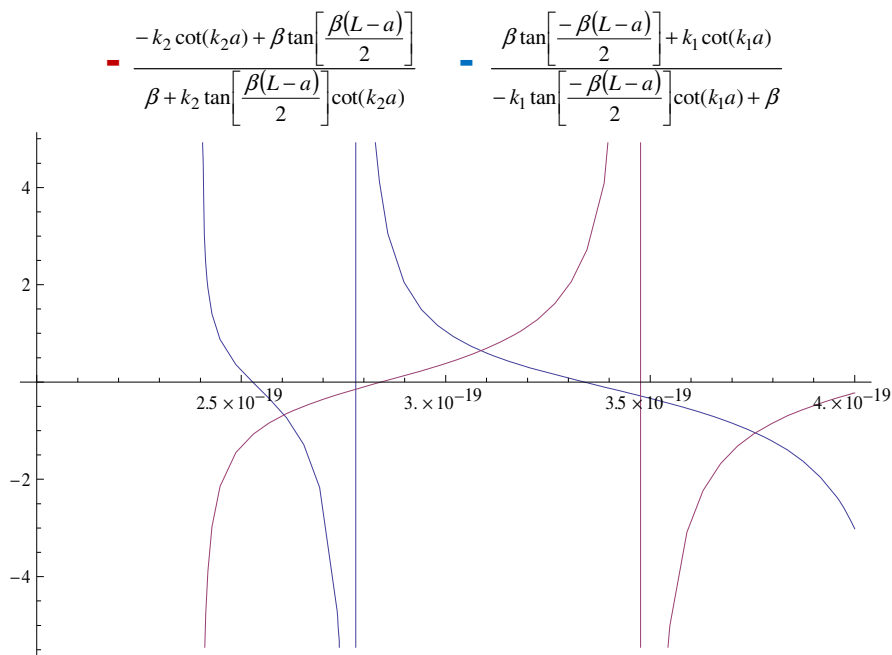


Gráfico B.13 Equação transc. acima da barreira de potencial em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

Para o poço de menor profundidade foi encontrado através do ponto de intersecção o autovalor de $3.823 \times 10^{-20} \text{J}$ (gráfico B.19). Somando este valor a diferença das profundidades, obtém-se $1.705 \times 10^{-19} \text{J}$. Os autovalores de energia correspondentes a $4.445 \times 10^{-20} \text{J}$ e $1.704 \times 10^{-20} \text{J}$, são pontos de intersecção do gráfico B.20.

B.3.2 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Simples

$$\text{---} -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad \text{---} \cot\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right)$$

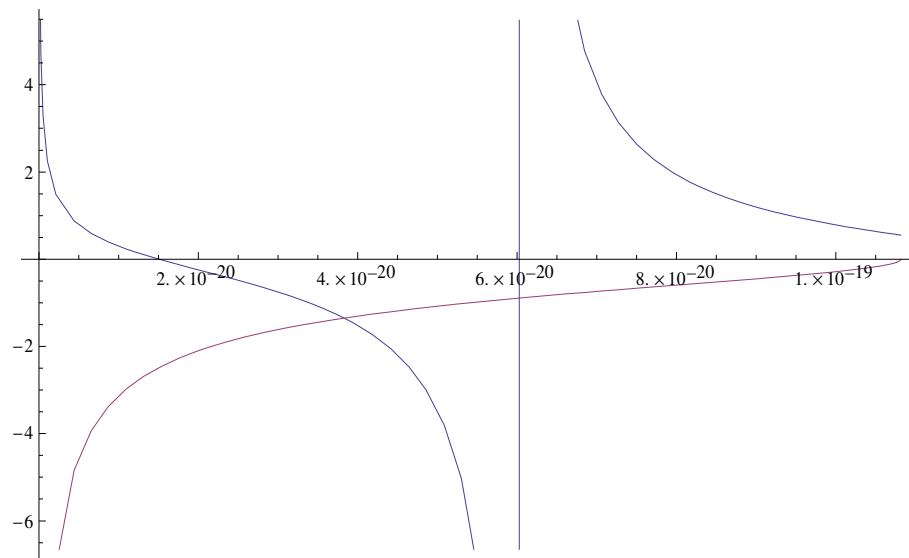


Gráfico B.14 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ nm}$.

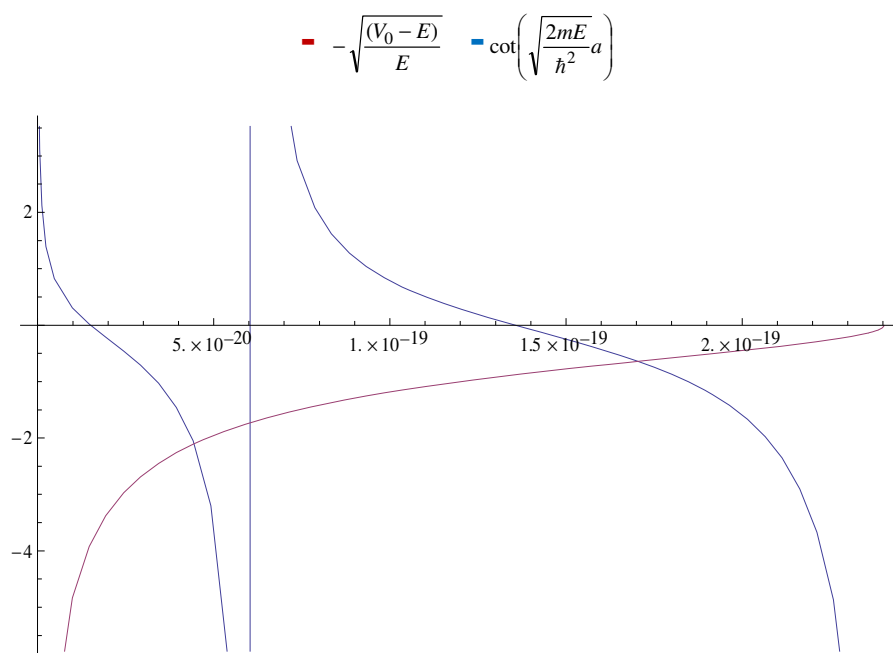


Gráfico B.15 Equação transc. para o poço simples em função da energia para: $V_0 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $a = 1 \text{ nm}$.

B.4 PDQUA: $V_1 = 1,5 \text{ eV}$, $V_0 = 0,675 \text{ eV}$, $L = 2,8 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$

No quarto exemplo os valores utilizados para os potenciais foram: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$). O tamanho do poço (a) foi de 1 nm (nanômetro) e a distância (L) entre os dois poços foi de 2.8 nm . Os autovalores de energia encontrado no gráfico B.21 pelo ponto de intersecção foi de $4.444083 \times 10^{-20} \text{ J}$. No gráfico B.22 foram encontrados dois níveis de energia: $1.7038 \times 10^{-19} \text{ J}$ e $1.7053 \times 10^{-19} \text{ J}$, correspondendo os níveis ressonantes. O gráfico B.23 possui infinitos níveis de energia, do qual só será identificado o primeiro nível acima da barreira da potencial com o valor de $2.508 \times 10^{-19} \text{ J}$.

B.4.1 – Autovalores de Energia relacionados ao Poço Duplo

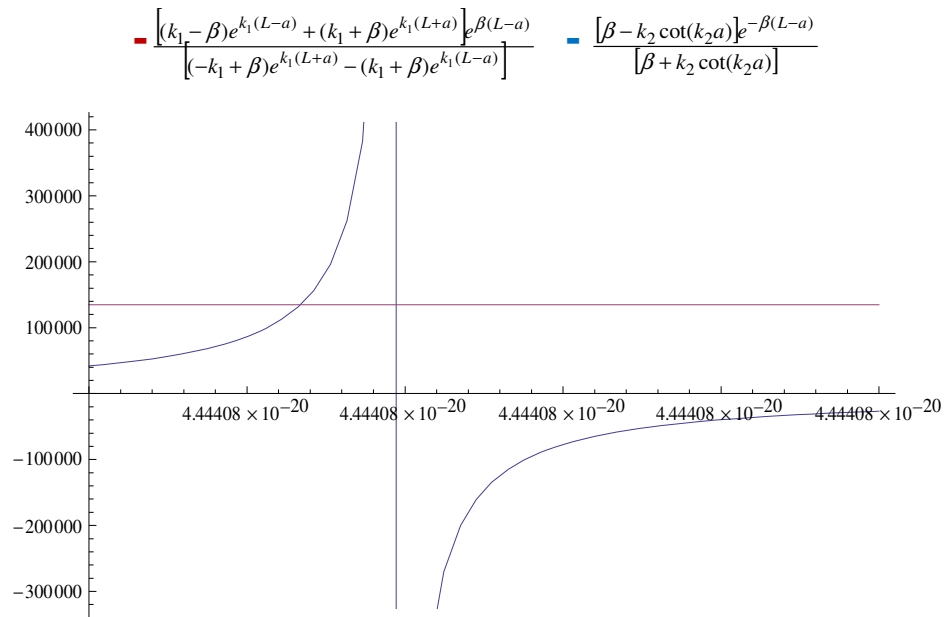


Gráfico B.16 Equação transc. do sistema abaixo de $(V_1 - V_0)$ em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2.8 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

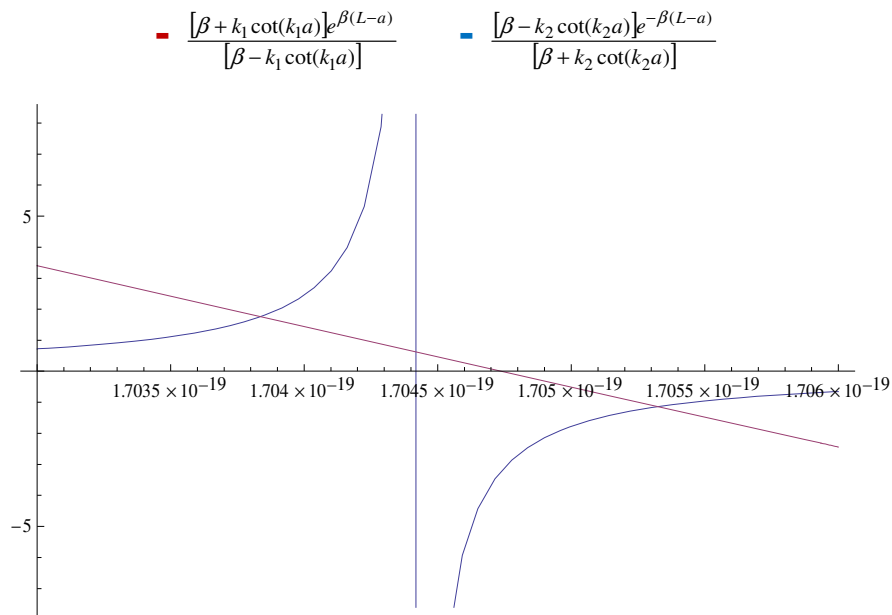


Gráfico B.17 Equação transc. entre os dois mínimos de potencial em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2.8 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

$$\begin{aligned}
 \text{---} & \frac{-k_2 \cot(k_2 a) + \beta \tan\left[\frac{\beta(L-a)}{2}\right]}{\beta + k_2 \tan\left[\frac{\beta(L-a)}{2}\right] \cot(k_2 a)} & \text{---} & \frac{\beta \tan\left[\frac{-\beta(L-a)}{2}\right] + k_1 \cot(k_1 a)}{-k_1 \tan\left[\frac{-\beta(L-a)}{2}\right] \cot(k_1 a) + \beta}
 \end{aligned}$$

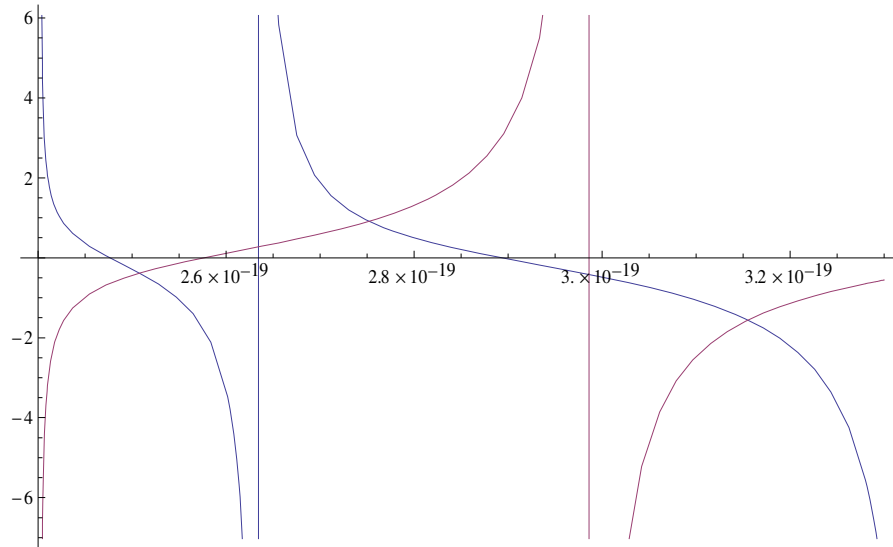


Gráfico B.18 Equação transc. acima da barreira de potencial em função da energia para: $V_1 = 1.5 \text{ eV}$ ($2.403 \times 10^{-19} \text{ J}$) e $V_0 = 0.675 \text{ eV}$ ($1.081 \times 10^{-19} \text{ J}$), $L = 2.8 \text{ nm}$ e $a = 1 \text{ nm}$.

Como a única diferença entre o quarto e o quinto exemplo é a distância entre os poços (L), os poços simples são os mesmos do quarto exemplo.