

ANGELO ROBER PULICI

TUNELAMENTO QUÂNTICO EM SISTEMAS BIESTÁVEIS

São José do Rio Preto - SP

2002

ANGELO ROBER PULICI

TUNELAMENTO QUÂNTICO EM SISTEMAS BIESTÁVEIS

Dissertação apresentada para obtenção do grau de Mestre em Física, área de concentração em Biofísica Molecular. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP.

ORIENTADOR: PROF. DR. ELSO DRIGO FILHO

SUPORTE:



São José do Rio Preto - SP

2002

ANGELO ROBER PULICI

TUNELAMENTO QUÂNTICO EM SISTEMAS BIESTÁVEIS

Dissertação apresentada para obtenção do grau de Mestre em Física, área de concentração em Biofísica Molecular. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Elso Drigo Filho

UNESP – São José do Rio Preto

Orientador

Prof. Dr. Keizo Yukimitu

UNESP – Ilha Solteira

Prof. Dr. Aldo Tancredo

UNESP – Rio Claro

São José do Rio Preto, 29 de novembro de 2002.

Pulici, Angelo Rober.

Tunelamento quântico em sistemas biestáveis / Angelo Rober Pulici – São José do Rio Preto : [s.n.], 2002

125 f. ; 30 cm.

Orientador: Elso Drigo Filho

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista.
Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Física quântica. 2. Teoria quântica. 3. Poços quânticos - Quadráticos. 4. Poços quânticos - Simétricos e assimétricos. 5. Tunelamento (Física). I. Drigo Filho, Elso. II. Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas. III. Título.

CDU – 530.145

Ficha Catalográfica

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao meu filho Mateus.

“Faz-se ciência com os fatos, como se faz uma casa com pedras; mas uma acumulação de fatos não é ciência, assim como um monte de pedras não é uma casa”.

Henri Poincaré

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Elso Drigo Filho, pela orientação, amizade e incentivo no decorrer e conclusão deste trabalho.

Agradeço ao Prof. Dr. José Roberto Ruggiero e ao Prof. Dr. Jorge Chahine, pelas discussões e contribuições sugerindo algumas correções no Exame Geral de Qualificação.

Agradeço ao Dr. Marco Antônio Cândido Ribeiro e ao Dr. Vitor Barbanti Pereira Leite, pelo apoio e auxílio nas minhas apresentações durante os seminários participando da evolução desta pesquisa.

Agradeço aos professores Dr. Augusto Agostinho Neto, Dr. Walter Filgueira de Azevedo Jr., e Dr. João Ruggiero Neto, que me ensinaram.

Agradeço aos colegas que me acompanharam neste trabalho em busca de meus objetivos.

Agradeço o suporte financeiro concedido pela CAPES.

RESUMO

Nesta dissertação é apresentado um estudo sobre tunelamento quântico em potenciais biestáveis.

Os sistemas analisados consistem de potenciais duplos quadráticos simétricos e assimétricos, visando determinar os tempos de tunelamento característicos. É estudado o fenômeno da ressonância nas transições quânticas na presença de uma perturbação.

São obtidos os níveis de energia para diferentes valores da largura e profundidade dos poços, e também, da largura da barreira de potencial entre os poços.

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

ABSTRACT

In this dissertation a study is presented on quantum tunnelling in double potentials steady.

The analyzed systems consist of symmetrical and asymmetrical quadratic double potentials, seeking to determine the times of characteristic tunnelling. It is studied the phenomenon of the resonance in the quantum transitions in the presence of a perturbation.

The levels of energy are obtained for different values of the width and depth of the wells, and also, of the width of the potential barrier among the wells.

KEYWORDS: One Dimensional Asymmetric Double Square Well, Tunneling, Photosynthesis.

LISTA DE FIGURAS

2.1 Variação, com respeito a ω , da probabilidade de transição $P_{if}(t; \omega)$	30
3.1 Gráfico da variação das energias E_+ e E_- em relação à diferença de energia Δ	39
4.1 Representação do potencial $V(x)$ do poço simétrico	47
5.1 Representação do potencial $V(x)$ do poço assimétrico	59
5.2 Variação de energia $\Delta \varepsilon$ x a razão da distância L e a largura a dos poços	69
6.1 Dois níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1 \times 10^{-10}$ m	74
6.2 Dois níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,2 \times 10^{-10}$ m	75
6.3 Quatro níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,5 \times 10^{-10}$ m	75
6.4 Quatro níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,8 \times 10^{-10}$ m	76
7.1 Gráfico de $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ x t ; com $\omega \neq \omega_{fi}$	86
7.2 Gráfico de $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ x t ; com $\omega = \omega_{fi}$	87
C.1 Um poço de potencial quadrado infinito	106
D.1 Um poço de potencial quadrado finito em um dos extremos	112
D.2 Gráfico de $ \sin ka $ em função de k , e regiões onde a $\cot ka < 0$	116
D.3 Autovalores da energia para uma barreira de potencial de 1×10^3 eV	117
E.1 Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 8,010 \times 10^{-18}$ J	119
E.2 Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 1,602 \times 10^{-17}$ J	119

E.3 Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$	120
E.4 Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$	121
E.5 Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 2,0925 \times 10^{-17} \text{ J}$	122
E.6 Autovalor da energia $E_1 = 4,349 \times 10^{-18} \text{ J}$ para $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 2,0925 \times 10^{-17} \text{ J}$..	123
E.7 Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 1,602 \times 10^{-17} \text{ J}$	124
E.8 Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$	124

LISTA DE TABELAS

4.1 Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço simples	55
4.2 Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço duplo simétrico	56
4.3 Relação entre o potencial e o tempo de tunelamento	56
5.1 Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço duplo assimétrico	67
5.2 Relação entre o potencial e o tempo de tunelamento	69
6.1 O tempo de tunelamento T_0 em função da distância L do poço simétrico	72
6.2 O tempo de tunelamento T_0 em função da largura a do poço simétrico	73
6.3 O tempo de tunelamento T_0 e T_1 em função da largura a e L do poço simétrico	77
6.4 O tempo de tunelamento T_0 , T_1 e T_2 em função da profundidade do poço V_0	78

SUMÁRIO

1. Introdução	15
2. Transições quânticas em sistemas unidimensionais	17
2.1. Descrição	17
2.2. Solução aproximada da equação de Schrödinger	19
2.3. Perturbação constante ou senoidal	25
2.3.1. Aplicação das equações gerais	25
2.3.2. Perturbação senoidal com dois estados discretos acoplados	28
3. Sistemas de dois níveis	33
3.1. Descrição	33
3.2. Efeito da perturbação nos estados estacionários do sistema	35
3.3. Fórmula de Rabi	40
3.3.1. Evolução do vetor no instante t	40
3.3.2. Cálculo da probabilidade $P_{12}(t)$	42
4. Poço duplo quadrado unidimensional simétrico	46
4.1. Descrição	46
4.2. Solução analítica	46
4.2.1. A energia total menor que a barreira de potencial ($E < V_0$)	48
4.2.2. A energia total maior que a barreira de potencial ($E > V_0$)	52

4.3. Redução ao potencial de poço infinito	54
4.4. Resultados numéricos	54
5. Poço duplo quadrado unidimensional assimétrico	58
5.1. Descrição	58
5.2. Solução da equação de Schrödinger para o poço duplo assimétrico	58
5.2.1. A energia total menor que a barreira de potencial ($E < V_1$)	61
5.2.2. A energia total maior que a barreira de potencial ($E > V_1$)	64
5.3. Redução da solução encontrada àquela do potencial de poço duplo simétrico	66
5.4. Resultados numéricos	66
6. Dependência dos níveis de energia com os parâmetros geométricos do poço	71
6.1. Descrição	71
6.2. Variação do parâmetro L	71
6.3. Variação do parâmetro a	73
6.4. Variação do parâmetro a e L	76
6.5. Variação do parâmetro V_0	77
7. Oscilação entre dois estados discretos na presença de uma perturbação	79
7.1. Descrição	79
7.2. O método da aproximação secular	80
7.3. Solução do sistema de equações	81
7.4. Probabilidade de transição e de tunelamento em processos fotossintéticos	84

8. Conclusão	89
Referências	92
Apêndice A. Regra de ouro de Fermi	94
Apêndice B. Diagonalização de uma matriz Hermitiana 2x2	98
Apêndice C. Poço de potencial quadrado infinito	106
Apêndice D. Poço quadrado finito em um dos extremos	112
Apêndice E. Resultados numéricos e gráficos para o poço simétrico e assimétrico	118

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho é estudado o problema quântico envolvendo tunelamento em potenciais biestáveis. Particularmente, são tratados o potencial de poço duplo quadrado unidimensional simétrico e o assimétrico. Estes poços são diferenciados quanto à profundidade; ou seja, no poço duplo simétrico as profundidades dos poços são iguais, enquanto no poço duplo assimétrico elas são diferentes. São analisados casos para partículas que tenham energias tanto acima como abaixo da barreira de potencial.

Na situação em que a altura da barreira de potencial supera a energia da partícula é analisada a probabilidade de ela passar para outro lado da barreira. Este efeito puramente quântico é chamado efeito túnel [1, 2, 3], que consiste na propriedade da partícula transpor barreiras de potencial penetrando em regiões classicamente proibidas. Este fenômeno tem grande relevância na biologia [2], na física [4], e na química [5, 6]. Exemplos onde este processo de tunelamento é importante são o movimento de prótons em ligações de hidrogênio, a inversão intramolecular da amônia [1] e a transferência de elétrons em proteínas [2]. Uma grandeza de interesse no estudo deste tipo de fenômeno é o chamado tempo de tunelamento, que está relacionado com a diferença entre os dois níveis de energia mais baixos.

O primeiro tópico a ser discutido é o fenômeno da ressonância nas transições quânticas em sistemas unidimensionais e na presença de uma perturbação senoidal com dois estados discretos acoplados. Esta característica ressonante ocorre quando a frequência angular da perturbação coincide com a frequência angular de Bohr associada com o par de estados considerados, este aspecto pode ser visto com mais detalhes no capítulo 2.

Por outro lado, a propriedade de sistemas de dois estados, para obtenção do tempo de tunelamento pode ser descrita pela fórmula de Rabi [1], tanto no caso ressonante como no caso não ressonante, conforme descrito no capítulo 3. Verifica-se em situações de ressonância (por exemplo, na molécula de benzeno C_6H_6 e no íon H_2^+) que uma perturbação entre dois estados de mesma energia produz no sistema uma oscilação de um estado para outro com frequência proporcional a perturbação.

Nos capítulos 4 e 5, são determinadas as soluções analíticas da equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial de poço duplo quadrado simétrico [1, 7, 8, 9] e assimétrico. Nota-se para estes dois tipos de poços, em particular para o caso ressonante, haver um desdobramento dos níveis de energia em relação aos do poço simples [8], que é cada vez mais evidente à medida que os poços se aproximam entre si. Este efeito era esperado uma vez que o potencial biestável pode ser considerado como a junção de dois poços simples. Neste caso, as funções de onda resultantes podem ser aproximadas por combinações lineares das autofunções originais, dando origem a dois níveis de energia.

No capítulo 6 uma análise gráfica é utilizada na obtenção dos níveis de energia para diferentes valores da profundidade e da largura dos poços, e ainda, para diversos valores da largura da barreira; explorando a dependência dos autovalores da energia com os parâmetros geométricos dos poços. As profundidades dos poços utilizadas variam de 50 eV a 300 eV.

No capítulo 7 é analisada a concorrência entre a probabilidade de transição e de tunelamento entre dois estados discretos de um sistema oscilante sobre o efeito de uma perturbação ressonante.

Os cálculos realizados neste trabalho foram feitos com o auxílio do software Mathematica (Wolfram, 1999).

Capítulo 2

Transições quânticas em sistemas unidimensionais

2.1 - Descrição:

Neste capítulo são tratadas as transições quânticas em sistemas biestáveis unidimensionais na presença de uma perturbação senoidal com dois estados discretos acoplados.

Considerando um sistema físico com Hamiltoniano H_0 , cujos autovalores e autovetores são descritos, respectivamente, por E_n e $|\varphi_n\rangle$:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle. \quad (2.1)$$

O Hamiltoniano H_0 pode ser considerado como sendo discreto e não degenerado; e, também, não explicitamente dependente do tempo; onde seus autoestados $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$ são estados estacionários.

Em $t = 0$, é aplicada uma perturbação $W(t)$ no sistema, descrita a seguir:

$$W(t) = \lambda \hat{W}(t), \quad (2.2)$$

sendo $\lambda \ll 1$, um parâmetro real adimensional; e $\hat{W}(t)$ tem a mesma ordem de magnitude de H_0 .

Assume-se que o sistema esteja inicialmente no estado estacionário $|\varphi_i\rangle$, um autoestado de H_0 de autovalor E_i .

O Hamiltoniano na presença de uma perturbação é denotado por:

$$H(t) = H_0 + W(t). \quad (2.3)$$

O que resulta em uma equação de Schrödinger da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \left[H_0 + \lambda \hat{W}(t) \right] |\Psi(t)\rangle. \quad (2.4)$$

A solução $|\Psi(t)\rangle$ desta equação diferencial de primeira ordem deve satisfazer à condição inicial dada por:

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle. \quad (2.5)$$

Nestas condições, a probabilidade de encontrar o sistema no autoestado final $|\varphi_f\rangle$ de H_0 num tempo t é dada por:

$$P_{if}(t) = \left| \langle \varphi_f | \Psi(t) \rangle \right|^2. \quad (2.6)$$

2.2 - Solução aproximada da equação de Schrödinger:

Procurando obter a probabilidade expressa em (2.6), primeiro considera-se $c_n(t)$ como sendo as componentes do ket $|\Psi(t)\rangle$ na base $\{|\varphi_n\rangle\}$, ou seja:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle, \quad (2.7)$$

com:

$$c_n(t) = \langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle. \quad (2.8)$$

Por outro lado, sendo $\hat{W}_{nk}(t)$ os elementos de matriz de $\hat{W}(t)$ na mesma base, tem-se:

$$\langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle = \hat{W}_{nk}(t) , \quad (2.9)$$

e o Hamiltoniano H_0 é representado pela matriz diagonal:

$$\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_k \rangle = E_n \delta_{nk} , \quad (2.10)$$

lembrando que:

$$\sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| = 1. \quad (2.11)$$

e aplicando $|\varphi_n\rangle$ em ambos os lados da equação de Schrödinger (2.4), obtém-se:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda \hat{W}_{nk}(t) c_k(t) , \quad (2.12)$$

onde se usaram as relações (2.8), (2.9) e (2.10).

Observa-se que quando $\lambda \hat{W}(t) = 0$ a relação (2.12) é solucionada por:

$$c_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar} , \quad (2.13)$$

onde b_n é uma constante que depende das condições iniciais.

Se $\lambda \hat{W}(t) \neq 0$; com $\lambda \hat{W}(t) \ll H_0$, pode-se propor que b_n dependa do tempo. Variando lentamente $b_n(t)$, assim ao invés de (2.13) tem-se:

$$c_n(t) = b_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}, \quad (2.14)$$

que substituída em (2.12), chega-se à expressão:

$$i\hbar e^{-iE_nt/\hbar} \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t) e^{-iE_nt/\hbar} = E_n b_n(t) e^{-iE_nt/\hbar} + \sum_k \lambda \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{-iE_k t/\hbar}. \quad (2.15)$$

Definindo a frequência angular de Bohr como:

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}, \quad (2.16)$$

e multiplicando ambos os lados por $e^{iE_nt/\hbar}$, obtém-se:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{i\omega_{nk}t}. \quad (2.17)$$

A determinação de $b_n(t)$ pode ser feita através de uma expansão em séries de potência em λ , ou seja:

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots \quad (2.18)$$

Substituindo esta expressão na equação diferencial (2.17), e selecionando os coeficientes de mesma ordem em λ (λ^r) em ambos os lados, obtém-se:

para $r = 0$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(0)}(t) = 0, \quad (2.19)$$

e para $r \neq 0$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t). \quad (2.20)$$

De todos os coeficientes de $b_n(t)$, somente $b_i(t)$ é diferente de zero (e, além disso, independente de t desde que $\hat{W}$ seja nulo). Em $t = 0$, $\lambda \hat{W}(t)$ pode tornar-se descontínua entre

0 e $\lambda \hat{W}(0)$. Contudo, desde que $\lambda \hat{W}(t)$ permanece finita, a solução da equação de Schrödinger é contínua para $t = 0$; então:

$$b_n(t = 0) = \delta_{ni} . \quad (2.21)$$

Os coeficientes de expansão são:

$$b_n^{(0)}(t = 0) = \delta_{ni} , \quad (2.22)$$

$$b_n^{(r)}(t = 0) = 0 \quad \text{se } r \geq 1. \quad (2.23)$$

Conforme (2.19), obtém-se a solução de ordem zero, ou seja:

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} , \quad (2.24)$$

Usando esta definição $b_n^{(0)}(t)$ é possível determinar $b_n^{(1)}(t)$ fazendo $r = 1$ na expressão (2.20).

Isto conduz a:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni}t} \hat{W}_{ni}(t) . \quad (2.25)$$

Efetuada a integração, obtém-se:

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \hat{W}_{ni}(t') dt' . \quad (2.26)$$

Em termos da probabilidade de haver transição do estado inicial (i) para um estado final (f), de acordo com (2.6) e a definição (2.8) de $c_f(t)$, a probabilidade de transição $P_{if}(t)$ é igual a $|c_f(t)|^2$, isto é, desde que $b_f(t)$ e $c_f(t)$ possuam o mesmo módulo, conforme (2.14); logo:

$$P_{if}(t) = |b_f(t)|^2 . \quad (2.27)$$

onde $b_f(t)$ também pode ser expandido em uma série de potência de λ :

$$b_f(t) = b_f^{(0)}(t) + \lambda b_f^{(1)}(t) + \lambda^2 b_f^{(2)}(t) + \dots , \quad (2.28)$$

como $b_f^{(0)}(t) = 0$, pois as transições induzidas por $\lambda \hat{W}(t)$ estão entre dois estados estacionários distintos de H_0 . Consequentemente, em primeira ordem de perturbação a probabilidade de transição torna-se:

$$P_{if}(t) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 , \quad (2.29)$$

Ou seja, utilizando a relação (2.26), e lembrando que $\hat{W}(t) = W(t)$, tem-se:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2, \quad (2.30)$$

que representa a probabilidade de transição do estado inicial (i) para o estado final (f).

2.3 - Perturbação constante e senoidal:

Duas expressões particulares para a perturbação são empregadas nesta seção. Pretende-se analisar o fenômeno da ressonância quando uma perturbação constante ou senoidal com dois estados discretos acoplados está presente.

2.3.1 - Aplicação das equações gerais:

Considera-se que $W(t)$ apresenta uma das duas formas simples a seguir:

$$\hat{W}(t) = \hat{W} \sin \omega t, \quad (2.31)$$

ou

$$\hat{W}(t) = \hat{W} \cos \omega t, \quad (2.32)$$

onde $\hat{W}$ é independente do tempo e ω representa a frequência angular constante.

Neste caso, o elemento de matriz $\hat{W}_{fi}(t)$ é denotado por:

$$\hat{W}_{fi}(t) = \hat{W}_{fi} \operatorname{sen} \omega t = \frac{\hat{W}_{fi}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}), \quad (2.33)$$

onde $\hat{W}_{fi}$ é um número complexo independente do tempo.

Com a finalidade de obter a probabilidade de transição, primeiro tem-se a intenção de determinar a expressão $b_n^{(1)}(t)$, substituindo (2.33) em (2.26), ou seja:

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{\hat{W}_{ni}}{2\hbar} \int_0^t \left[e^{i(\omega_{ni} + \omega)t'} - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t'} \right] dt'. \quad (2.34)$$

Integrando esta expressão o resultado é:

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{\hat{W}_{ni}}{2i\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right]. \quad (2.35)$$

Então, neste exemplo particular, a probabilidade de transição expressa em (2.29) adquire a forma:

$$P_{if}(t; \omega) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|\hat{W}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2. \quad (2.36)$$

O mesmo processo pode ser repetido quando se utiliza a forma (2.32) ao invés de (2.31) para a perturbação. O cálculo é análogo e conduz a:

$$P_{if}(t; \omega) = \lambda^2 \left| b_f^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2. \quad (2.37)$$

O caso em que a perturbação é constante pode ser obtida fazendo $\omega = 0$. Nesta condição, $\hat{W} \cos \omega t$ torna-se independente do tempo. Assim, a probabilidade de transição $P_{if}(t)$ induzida por uma perturbação constante W pode ser obtida diretamente através da substituição de ω por 0 em (2.37); logo:

$$P_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| 1 - e^{i\omega_{fi}t} \right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\text{sen}(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t; \omega_{fi}), \quad (2.38)$$

com:

$$F(t; \omega_{fi}) = \left[\frac{\text{sen}(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2. \quad (2.39)$$

2.3.2 - Perturbação senoidal com dois estados discretos acoplados:

Neste tópico analisa-se o fenômeno da ressonância quando o espectro de H_0 é discreto. Isto equivale a dizer que nos dois lados da barreira de potencial tem-se estados ligados. Outra situação seria o estado inicial $|\varphi_i\rangle$ estar acoplado a um contínuo de estados finais. Este último caso conduz a conhecida fórmula da “regra de ouro de Fermi”, cuja determinação é realizada no apêndice A [1, 14, 16].

Quando o tempo t é fixo, a probabilidade de transição $P_{if}(t; \omega)$ é uma função somente da variável ω . Esta função será máxima quando: $\omega \cong \omega_{fi}$ ou $\omega \cong -\omega_{fi}$, isto pode ser visto na relação (2.37). O fenômeno de ressonância ocorre quando a frequência angular da perturbação coincide com a frequência angular de Bohr, associada com o par de estados inicial $(|\varphi_i\rangle)$ e final $(|\varphi_f\rangle)$. Se $\omega \geq 0$ as condições de ressonância correspondem aos casos $\omega_{fi} > 0$ ou $\omega_{fi} < 0$. No primeiro caso o sistema sofre transição do nível de energia mais baixo E_i para o nível de energia mais alto E_f realizando absorção de um quantum de energia ($\hbar\omega$). No segundo caso a perturbação ressonante estimula a passagem do sistema do nível de energia mais alto E_i para o nível de energia mais baixo E_f acompanhado pela emissão induzida de um quantum de energia.

Nota-se nas expressões (2.36) e (2.37) que a transição de probabilidade $P_{if}(t; \omega)$ envolve o quadrado do módulo da soma de dois termos complexos, ou seja:

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{\hat{f}} + \omega)t}}{\omega_{\hat{f}} + \omega} = -ie^{i(\omega_{\hat{f}} + \omega)t/2} \frac{\text{sen}\left[(\omega_{\hat{f}} + \omega)t/2\right]}{(\omega_{\hat{f}} + \omega)/2}, \quad (2.40)$$

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{\hat{f}} - \omega)t}}{\omega_{\hat{f}} - \omega} = -ie^{i(\omega_{\hat{f}} - \omega)t/2} \frac{\text{sen}\left[(\omega_{\hat{f}} - \omega)t/2\right]}{(\omega_{\hat{f}} - \omega)/2}. \quad (2.41)$$

Nestas igualdades o denominador tende a zero no termo A_- quando $\omega = \omega_{\hat{f}}$ e no termo A_+ quando $\omega = -\omega_{\hat{f}}$. O termo A_- é chamado “termo ressonante” e o termo A_+ é chamado “termo antirressonante”.

Considerando o caso em que $|\omega - \omega_{\hat{f}}| \ll |\omega_{\hat{f}}|$, a probabilidade de transição obtida utilizando a expressão (2.41) em (2.37) é:

$$P_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{\hat{f}}|^2}{4\hbar^2} F(t; \omega - \omega_{\hat{f}}), \quad (2.42)$$

com:

$$F(t; \omega - \omega_{\hat{f}}) = \left\{ \frac{\text{sen}\left[(\omega_{\hat{f}} - \omega)t/2\right]}{(\omega_{\hat{f}} - \omega)/2} \right\}^2. \quad (2.43)$$

Uma representação gráfica da variação de $P_{if}(t; \omega)$ em relação à ω , considerando t fixo, é mostrada na figura (2.1).

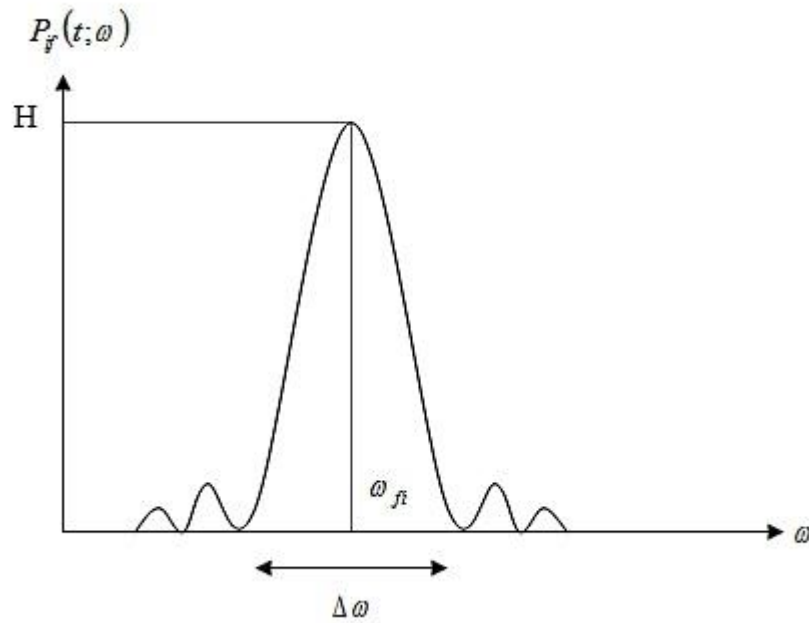


Figura 2.1. Variação, com respeito a ω , da probabilidade de transição $P_{if}(t; \omega)$.

Na figura (2.1), $H = \frac{|W_{fi}|^2 t^2}{4\hbar^2}$, representando um máximo na probabilidade de transição

$P_{if}(t; \omega)$ quando $\omega = \omega_{fi}$. Nesta figura nota-se a variação, em função de ω , da probabilidade

$P_{if}(t; \omega)$ associada à uma perturbação senoidal de frequência angular ω com um tempo t fixo.

Por outro lado, a largura de ressonância $\Delta \omega$, pode ser aproximadamente definida como sendo

a distância entre os dois primeiros zeros de $P_{if}(t; \omega)$ em torno de $\omega = \omega_{fi}$. Quando $\omega \approx \omega_{fi}$, a

ressonância é proporcional a t^2 e a largura de ressonância $\Delta \omega$ é inversamente proporcional a

t . Observa-se que a probabilidade decresce, indo a zero para $|\omega - \omega_{fi}| = 2\pi / t$; quando $|\omega - \omega_{fi}|$

aumenta, ela oscila entre $|W_{fi}|^2 / \hbar^2 (\omega - \omega_{fi})^2$ e zero.

Nota-se de acordo com a figura (2.1) que a maior contribuição em $P_{if}(t; \omega)$ é ocasionada por $\Delta \omega$, e do pico máximo ao primeiro mínimo tem-se que $|\omega - \omega_{fi}| = 2\pi / t$; então, o intervalo entre os dois primeiros mínimos é:

$$\Delta \omega \cong \frac{4\pi}{t}. \quad (2.44)$$

A expressão (2.44) indica a possibilidade de ser realizada uma analogia da largura de ressonância de $\Delta \omega$ com o princípio da incerteza de Heisenberg, referente ao tempo e à energia. Isto é feito considerando $E_f - E_i = \hbar \omega_{fi}$, e se a perturbação atua durante um tempo t , a incerteza ΔE no valor $E_f - E_i$, usando a relação (2.44) é $\Delta E = \hbar \Delta \omega \cong \frac{\hbar}{t}$. Assim, o produto $t \Delta E$ não pode ser muito menor que $\hbar$.

A forma da função $|A_-(\omega)|^2$ é mostrada na figura (2.1). Desde que $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(-\omega)|^2$, $|A_+(\omega)|^2$ pode ser obtida por simetria com relação ao eixo vertical em $\omega = 0$. Se estas duas curvas, de largura de ressonância $\Delta \omega$, estão centradas em pontos cuja separação é muito maior que $\Delta \omega$, na vizinhança de $\omega = \omega_{fi}$, o módulo de A_+ é desprezível comparado à A_- . A aproximação ressonante é justificada na condição que:

$$2|\omega_{fi}| \gg \Delta \omega. \quad (2.45)$$

E utilizando a relação (2.44) tem-se:

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|} \cong \frac{1}{\omega} . \quad (2.46)$$

Na ressonância, onde $\omega = \omega_{fi}$, tem-se:

$$P_{if}(t; \omega = \omega_{fi}) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} t^2 . \quad (2.47)$$

Na prática, para a aproximação em primeira ordem ser válida na ressonância, a probabilidade em (2.47) deve ser muito menor que 1, isto é:

$$t \ll \frac{\hbar}{|W_{fi}|} , \quad (2.48)$$

logo:

$$\frac{1}{|\omega_{fi}|} \ll \frac{\hbar}{|W_{fi}|} . \quad (2.49)$$

Esta desigualdade indica que a diferença de energia $|E_f - E_i| = \hbar|\omega_{fi}|$ é muito maior que o elemento de matriz de $W(t)$ entre $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$.

Quando t não satisfaz a relação (2.48) a probabilidade de transição é calculada utilizando a aproximação secular que é tratada no capítulo 7.

Capítulo 3

Sistemas de dois níveis

3.1 - Descrição:

Neste capítulo estudam-se sistemas de dois estados com o propósito de obter o tempo de transição de um estado para outro. O formalismo desenvolvido pode ser usado para analisar o tunelamento de uma partícula em uma barreira de potencial, inclusive fornecendo um tempo característico para este processo.

Inicialmente, considera-se um sistema físico constituído de uma base com dois autoestados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ de um Hamiltoniano H_0 , cujos autovalores neste caso são, respectivamente, E_1 e E_2 , ou seja:

$$H_0 |\varphi_1\rangle = E_1 |\varphi_1\rangle, \quad (3.1)$$

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

Os autoestados formam uma base ortonormal, significando que:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} ; i, j = 1, 2. \quad (3.2)$$

Assumindo a presença de uma perturbação W , associada à H_0 , tem-se:

$$H = H_0 + W. \quad (3.3)$$

Os autoestados e autovalores do novo Hamiltoniano H são denotados por $|\Psi_{\pm}\rangle$ e $E_{\pm}$; sendo relacionados por:

$$H |\Psi_{+}\rangle = E_{+} |\Psi_{+}\rangle, \quad (3.4)$$

$$H |\Psi_{-}\rangle = E_{-} |\Psi_{-}\rangle.$$

Na base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ de autoestados de H_0 , chamados estados não perturbados, W é representada pela matriz Hermitiana:

$$(W) = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

onde será admitido que W_{11} e W_{22} são reais, e ainda:

$$W_{12} = W_{21}^* . \quad (3.6)$$

Uma vez que, na ausência de acoplamento, as energias possíveis do sistema são E_1 e E_2 , e os estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ são estados estacionários, o problema agora consiste em avaliar as modificações que aparecem quando a perturbação W é introduzida. A solução para esta questão é obtida através da seguinte consequência:

- a) Uma medição da energia do sistema pode produzir apenas um dos autovalores E_+ e E_- de H , que geralmente diferem de E_1 e E_2 . É necessário estabelecer a relação existente entre os novos níveis de energia E_+ e E_- em termos dos antigos níveis (E_1 , E_2) e os elementos de matriz W_{ij} .
- b) Considerando o sistema em $t = 0$ como estando no estado $|\varphi_1\rangle$, há uma certa probabilidade $P_{12}(t)$ de encontrá-lo no estado $|\varphi_2\rangle$ decorrido um tempo t . Em outras palavras, a perturbação W induz a transições entre os dois estados. Dado o aspecto dinâmico do efeito de W é possível determinar a probabilidade $P_{12}(t)$.

3.2 - Efeito da perturbação nos estados estacionários do sistema:

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

$$(H) = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

A diagonalização da matriz acima é efetuada em detalhes no apêndice B. Os autovalores, encontrados após a diagonalização, são:

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}, \quad (3.8)$$

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

Observa-se que se $W = 0$, E_+ e E_- são idênticos à E_1 e E_2 . 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 através do gráfico da figura (3.1).

Os autovetores associados com E_+ e E_- , conforme apêndice B, são descritos por:

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

$$+ \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} |\varphi_2\rangle , \quad (3.9.a)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_-\rangle = & - \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}} |\varphi_1\rangle \\ & + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} |\varphi_2\rangle . \end{aligned} \quad (3.9.b)$$

Admitindo-se $W_{12} = 0$, os autoestados de H são os mesmos de H_0 , e os novos autovalores são simplesmente $E_1 + W_{11}$ e $E_2 + W_{22}$. Por outro lado, assumindo que a matriz (W) é puramente não diagonal, isto é, que $W_{11} = W_{22} = 0$, a expressão (3.8) torna-se:

$$E_+ = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} , \quad (3.10.a)$$

$$E_- = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} . \quad (3.10.b)$$

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

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

(3.11)

$$\Delta = \frac{1}{2}(E_1 - E_2) .$$

Os autovalores da relação (3.10) podem ser reescritos como:

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

(3.12)

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

De maneira pictórica, pode-se pensar que quando Δ varia, E_+ e E_- descrevem os dois ramos de uma hipérbole que é simétrica e cujas assíntotas são as duas linhas retas associadas com os níveis não perturbados, conforme a figura (3.1). Na ausência de perturbação, os níveis E_1 e E_2 cruzam a origem (linhas retas tracejadas na figura (3.1)). Sob o efeito da perturbação W , os dois níveis perturbados afastam entre si, e as curvas originando E_+ e E_- em termos de Δ apresentam uma separação mínima $2|W_{12}|$. Nota-se que para qualquer Δ , tem-se:

$$|E_+ - E_-| > |E_1 - E_2| .$$

(3.13)

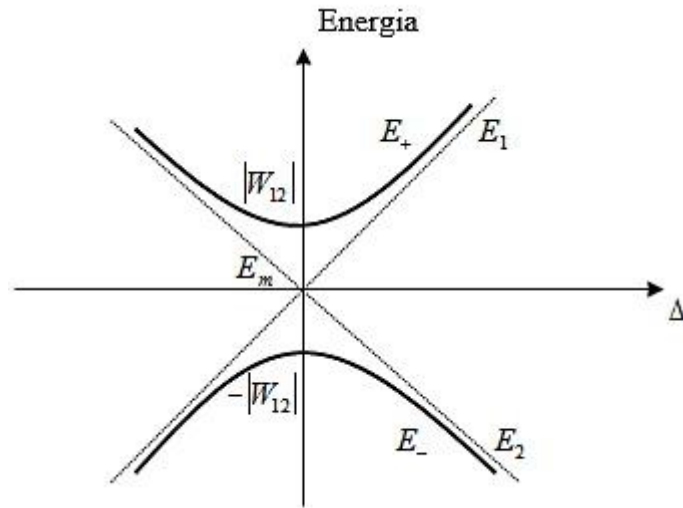


Figura 3.1 Gráfico da variação das energias E_+ e E_- em relação à diferença de energia Δ .

Nas proximidades das assíntotas, isto é, para $|\Delta| \gg |W_{12}|$, as fórmulas em (3.12) podem ser escritas na forma de uma expansão em série de potências em $\left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|$ como segue:

$$E_+ = E_m + \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|^2 + \dots \right), \quad (3.14)$$

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

Por outro lado, no centro da hipérbole, para $E_1 = E_2$ ($\Delta = 0$), as fórmulas em (3.12) ficam descritas por:

$$E_+ = E_m + |W_{12}|, \quad (3.15)$$

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

Das considerações acima se conclui que o efeito da perturbação é mais importante quando os dois níveis não perturbados possuem a mesma energia. O efeito é de primeira ordem, conforme visto na expressão (3.15), enquanto é de segunda ordem quando $|\Delta| \gg |W_{12}|$, conforme visto na expressão (3.14). Observa-se que para uma perturbação fraca ($E_1 - E_2 \gg |W_{12}|$), os estados perturbados diferem ligeiramente dos estados não perturbados, que correspondem às regiões próximas das assíntotas na figura (3.1). Por outro lado, para uma perturbação forte ($E_1 - E_2 \ll |W_{12}|$) os estados $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$ são muito diferentes dos estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, e correspondem ao centro da hipérbole indicada na figura (3.1). Assim, como as energias, os autoestados sofrem modificações significativas nas vizinhanças do ponto onde os dois estados não perturbados se cruzam [1].

3.3 - Fórmula de Rabi (oscilação do sistema entre dois estados):

3.3.1 - Comportamento do vetor estado durante um tempo t :

Considere um vetor de estado Ψ dependente do tempo, sendo escrito em termos dos autoestados do Hamiltoniano não perturbados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t) |\varphi_1\rangle + a_2(t) |\varphi_2\rangle . \quad (3.16)$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = (H_0 + W) |\Psi(t)\rangle . \quad (3.17)$$

Esta equação para o caso da perturbação ser não diagonal, $W = \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{21} & 0 \end{pmatrix}$, conduz a:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) = E_1 a_1(t) + W_{12} a_2(t) , \quad (3.18)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) = W_{21} a_1(t) + E_2 a_2(t) . \quad (3.19)$$

Estas equações constituem para $|W_{12}| \neq 0$, em um sistema linear de equações diferenciais acopladas. Supondo que o estado inicial para $t = 0$, é dado por:

$$|\Psi(0)\rangle = \lambda |\Psi_+\rangle + \mu |\Psi_-\rangle, \quad (3.20)$$

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

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda e^{\frac{-iE_+t}{\hbar}} |\Psi_+\rangle + \mu e^{\frac{-iE_-t}{\hbar}} |\Psi_-\rangle. \quad (3.21)$$

O vetor $|\Psi(t)\rangle$ dado por (3.21) oscila entre os dois estados não perturbados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ que nos permite obter $a_1(t)$ e $a_2(t)$ pela projeção de $|\Psi(t)\rangle$ sobre $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$. Assumindo que o sistema no tempo $t = 0$ está no estado $|\varphi_1\rangle$, ou seja, $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$, pode-se calcular a probabilidade de encontrá-lo no estado $|\varphi_2\rangle$ em um tempo t .

3.3.2 - Cálculo da probabilidade $P_{12}(t)$ de encontrar o sistema no estado $|\varphi_2\rangle$ no tempo t :

Usando a condição inicial $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$, desenvolvendo $|\Psi(0)\rangle$ na base $\{|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle\}$

e efetuando a inversão nas fórmulas de $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$, equações (3.9.a) e (3.9.b), o estado inicial torna-se igual a:

$$\begin{aligned}
|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = & \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} \left\{ \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_+\rangle \right. \\
& \left. - \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_-\rangle \right\}. \quad (3.22)
\end{aligned}$$

Os detalhes dos cálculos são mostrados no apêndice B.

Aplicando a relação (3.21) em (3.22), tem-se:

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle = & \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} \left\{ \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} e^{\frac{-iE_+ t}{\hbar}} |\Psi_+\rangle \right. \\
& \left. - \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} e^{\frac{-iE_- t}{\hbar}} |\Psi_-\rangle \right\}. \quad (3.23)
\end{aligned}$$

A amplitude de probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\varphi_2\rangle$ no tempo t é obtida projetando a função de onda (3.23) sobre o vetor $|\varphi_2\rangle$, descrita a seguir:

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

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(e^{-i E_+ t/\hbar} - e^{-i E_- t/\hbar} \right) . \quad (3.24)$$

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

$$\begin{aligned} P_{12}(t) &= \frac{1}{4} \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} 2 \left\{ 1 - \cos \left[(E_+ - E_-)t/\hbar \right] \right\} \\ &= \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} \text{sen}^2 \left[\frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar} \right] \\ &= \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} \text{sen}^2 \left[\frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} t}{2\hbar} \right] . \end{aligned} \quad (3.25)$$

A relação (3.25) é a chamada fórmula de Rabi [1] e fornece a probabilidade de transição do sistema entre o estado $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ durante um tempo t .

Observa-se que $P_{12}(t)$ oscila com uma frequência igual a $(E_+ - E_-)/\hbar$, esta grandeza é conhecida como a frequência de Bohr do sistema. A probabilidade $P_{12}(t)$ varia entre zero e um valor máximo igual a $\left\{ 4|W_{12}|^2 / \left[(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2 \right] \right\}$, e seu período é:

$$T = (2k + 1)\pi\hbar / (E_+ - E_-) ; \quad k = 0, 1, 2, \dots . \quad (3.26)$$

Quando os estados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$ têm a mesma energia não perturbada ($E_1 = E_2$), $(E_+ - E_-)/h$ é igual a $2|W_{12}|/h$, e $\left\{4|W_{12}|^2 / \left[(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2\right]\right\}$ torna-se igual ao valor 1.

O período passa a ser: $T = (2k + 1)\pi\hbar / 2|W_{12}|$, ou seja, se o sistema está inicialmente no estado $|\varphi_1\rangle$, após transcorrido um tempo T ele irá se encontrar no estado $|\varphi_2\rangle$. Um cálculo explícito deste período é realizado nos próximos capítulos, onde a resolução analítica para o poço duplo quadrado simétrico e assimétrico é indicada.

Uma perturbação entre dois estados com níveis de energia idênticos caracterizando um sistema ressonante produz no sistema uma oscilação de um estado para outro com frequência proporcional à perturbação.

O fenômeno de ressonância quântica pode ser encontrado em muitos sistemas físicos, por exemplo, na molécula de benzeno C_6H_6 , no íon H_2^+ [1] e, na inversão da molécula de amônia NH_3 [1, 10, 13]. Pode ser verificado, nestes casos, que no estado fundamental a função de onda é uma combinação linear dos estados eletrônicos $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$. No caso da amônia observa-se que há duas posições de equilíbrio totalmente equivalentes para o átomo de nitrogênio, uma de cada lado do plano que contém os átomos de hidrogênio. O átomo de nitrogênio penetra no plano formado pelos átomos de hidrogênio que constituem uma barreira, e aparecerá do outro lado, repetindo o processo novamente no sentido oposto. Nota-se que o átomo de nitrogênio oscila lentamente e sua frequência de oscilação quando a molécula está no estado fundamental é $2,3786 \times 10^{10}$ Hz. Essa frequência é muito menor que as encontradas em vibrações moleculares que não envolvem penetração de barreira, que são da ordem de 10^{14} Hz.

Capítulo 4

Poço duplo quadrado unidimensional simétrico

4.1 - Descrição:

Neste capítulo tem-se a finalidade de determinar a solução analítica de um potencial de poço duplo quadrado unidimensional e simétrico. Os autovalores da energia são obtidos através de equações transcendentais conforme referências [1, 7, 9, 12]. Um procedimento gráfico é utilizado na obtenção de alguns valores numéricos para os autovalores de energia com parâmetros geométricos do poço fixados previamente. A consistência da solução foi testada no limite de altas energias comparando os resultados com aqueles obtidos para o poço de potencial quadrado infinito (apêndice C).

4.2 - Solução analítica:

O potencial $V(x)$ a ser estudado consiste em um poço infinito com uma barreira de potencial na base e é descrito por:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \rightarrow |x| > (L+a)/2 & \text{(I e V)} \\ 0 & \rightarrow -(L+a)/2 < x < -(L-a)/2 & \text{(II)} \\ V_0 & \rightarrow -(L-a)/2 < x < (L-a)/2 & \text{(III)} \\ 0 & \rightarrow (L-a)/2 < x < (L+a)/2 & \text{(IV)} \end{cases} \quad (4.1)$$

Este potencial está representado na figura (4.1) onde são distinguidas cinco regiões características, uma delas envolve uma barreira de potencial V_0 , localizada na região III do gráfico, que separa os poços mais profundos das regiões II e IV onde o potencial é considerado nulo. Nos extremos opostos destes poços, nas regiões I e V, o potencial é infinito. De acordo com a geometria apresentada deve-se observar a condição de que $a < L$, sendo a a largura dos poços menores e $L + a$ a largura total do poço entre os valores infinitos do potencial.

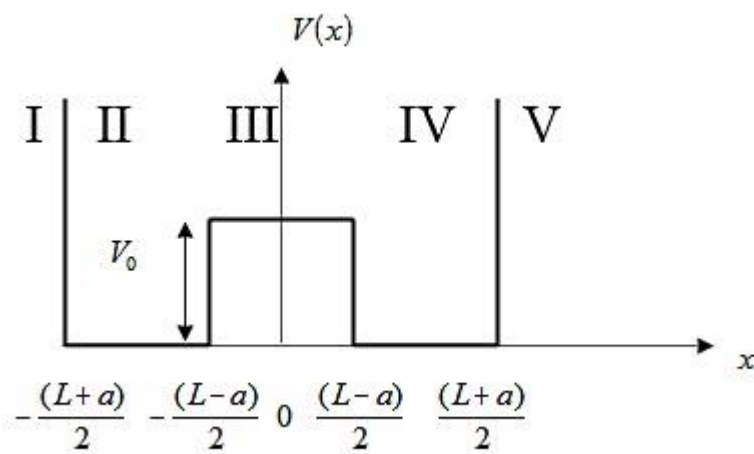


Figura 4.1. Representação do potencial $V(x)$ do poço simétrico.

A equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial $V(x)$ tem a forma geral:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (4.2)$$

Nas regiões II e IV o potencial $V(x)$ é nulo e pode ser escrito como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (4.3)$$

enquanto na região III o potencial é constante e diferente de zero, $V(x) = V_0$, e a equação de Schrödinger para esta região é dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (4.4)$$

Em termos das energias envolvidas o problema de resolver a equação de Schrödinger para o potencial estudado pode ser dividido em dois casos, a saber: $E > V_0$ e $E < V_0$, cada caso é detalhado a seguir.

4.2.1 - A energia total menor que a barreira de potencial ($E < V_0$):

Quando a energia do sistema é menor que a barreira de potencial V_0 , a solução do problema é dada por:

regiões I e V:

$$\Psi(x) = 0, \quad (4.5)$$

região II:

$$\Psi(x) = A_1 \sin kx + A_2 \cos kx, \quad (4.6)$$

região III:

$$\Psi(x) = B e^{\beta x} + C e^{-\beta x}, \quad (4.7)$$

e região IV:

$$\Psi(x) = D_1 \sin kx + D_2 \cos kx, \quad (4.8)$$

onde foram introduzidas por simplicidade de notação as quantidades:

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (4.9)$$

Nas regiões I e V a função de onda é nula devido ao potencial ser infinito ($V(x) \rightarrow \infty$) nestas regiões. Isso significa que nas fronteiras externas dos poços, $\Psi(x)$ satisfaz $\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = \Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0$. Aplicando estas condições de contorno o cosseno não é zero no segundo termo das expressões (4.6) e (4.8), fazendo com que A_2 e D_2 sejam nulos, ou seja, a solução (4.6) fica:

$$\Psi(x) = A \sin k \left[x + \frac{1}{2}(L+a) \right], \quad (4.10)$$

e a solução (4.8) vale:

$$\Psi(x) = D \sin k \left[x - \frac{1}{2}(L + a) \right], \quad (4.11)$$

onde $A_1 = A$ e $D_1 = D$.

Por outro lado, as funções de onda e suas derivadas são contínuas nos pontos $x = \pm \frac{(L-a)}{2}$

, envolvendo as seguintes condições de contorno:

$$B e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = A \sin k a, \quad (4.12)$$

$$B \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = A k \cos k a, \quad (4.13)$$

$$B e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} = -D \sin k a, \quad (4.14)$$

$$B \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} = D k \cos k a. \quad (4.15)$$

As equações (4.12) e (4.14) correspondem à continuidade das funções de onda nos dois pontos considerados, enquanto (4.13) e (4.15) representam a continuidade das derivadas destas funções nos pontos em questão.

Isolando A na equação (4.12) e substituindo em (4.13), obtém-se:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta + k \cot k a) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta - k \cot k a) e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}} . \quad (4.16)$$

Por outro lado, isolando D em (4.14) e substituindo em (4.15), chega-se a:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta - k \cot k a) e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta + k \cot k a) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}} . \quad (4.17)$$

Assim, igualando os lados direitos de (4.16) e (4.17), tem-se que:

$$\frac{(\beta + k \cot k a) e^{\beta(L-a)}}{(\beta - k \cot k a)} = \frac{(\beta - k \cot k a) e^{-\beta(L-a)}}{(\beta + k \cot k a)} , \quad (4.18)$$

ou de modo mais simplificado:

$$\frac{(\beta + k \cot k a)}{(\beta - k \cot k a)} = \pm e^{-\beta(L-a)} . \quad (4.19)$$

Efetuada um desenvolvimento algébrico esta relação pode ser reescrita em termos de funções hiperbólicas, cujo resultado é consistente ao obtido na referência [7]. Assim, ela passa a ser descrita, por duas expressões, da seguinte maneira:

$$k \cot ka = -\beta \tanh \frac{\beta}{2}(L-a) , \quad (4.20.a)$$

$$k \cot ka = -\beta \coth \frac{\beta}{2}(L-a) . \quad (4.20.b)$$

Estas equações transcendentais permitem determinar os autovalores da energia para o caso em que as energias envolvidas são menores que a barreira de potencial V_0 . Os resultados numéricos dos autovalores da energia para alguns valores da barreira de potencial V_0 são mostrados no apêndice E.

4.2.2 - 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 é dada por:

regiões I e V:

$$\Psi(x) = 0 , \quad (4.21)$$

região II:

$$\Psi(x) = A_1 \sin kx + A_2 \cos kx, \quad (4.22)$$

região III:

$$\Psi(x) = B \sin \beta x + C \cos \beta x, \quad (4.23)$$

e região IV:

$$\Psi(x) = D_1 \sin kx + D_2 \cos kx, \quad (4.24)$$

onde:

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (4.25)$$

Com raciocínio análogo ao feito no caso anterior, chega-se:

$$k \cot ka = \beta \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right]. \quad (4.26a)$$

$$k \cot ka = -\beta \cot \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right]. \quad (4.26b)$$

Estas equações transcendentais proporcionam a determinação dos autovalores da energia, para o caso em que as energias envolvidas são maiores que a barreira de potencial V_0 .

4.3 - Redução ao potencial de poço infinito:

No limite em que os autovalores de energia são muito maiores que a altura da barreira de potencial V_0 , tem-se que: $\beta \approx k$, e nestas condições para o poço infinito, cuja largura é $(L + a)$, a expressão (4.26) fornece:

$$k = \frac{n\pi}{(L + a)} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.27)$$

Como $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; os autovalores da energia para o limite estudado ($E \gg V_0$) são dados por:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m (L + a)^2} \quad (4.28)$$

Este é o resultado esperado para o poço infinito, conforme indicado no apêndice C. A expressão (4.28) fornece um teste de consistência da solução encontrada aqui para o poço duplo quadrado unidimensional simétrico.

4.4 - Resultados numéricos:

Considerou-se um sistema composto de um elétron sujeito a um potencial de poço duplo com uma barreira de potencial V_0 entre os dois poços. Na determinação dos níveis de energia e do tempo de tunelamento foi assumido sempre que $E < V_0$. Foram utilizados, primeiramente, para a largura dos poços e a distância entre eles, respectivamente, os valores: $a = 1 \times 10^{-10}$ m

e $L = 2 \times 10^{-10}$ m, depois foram usados outros valores para estes parâmetros na obtenção dos níveis de energia e do tempo de tunelamento.

Sabendo-se que o poço simples é um poço quadrado finito em um dos extremos conforme visto no apêndice D e que a junção de dois poços simples pelos extremos finitos produz um poço duplo; inicialmente, efetuou-se a determinação dos níveis de energia para o poço simples com o intuito de compará-los com os obtidos no poço duplo.

As tabelas (4.1) e (4.2) mostram os valores obtidos para os níveis de energia em função dos valores da barreira de potencial V_0 , para o poço simples e o poço duplo quadrado unidimensional simétrico, respectivamente, considerando $E < V_0$.

Nota-se que para um determinado valor da barreira de potencial, cada autovalor da energia no poço simples produz dois autovalores da energia distintos no poço duplo simétrico, cujo valor médio é próximo daquele encontrado no poço simples. Esta duplicação presente no poço duplo simétrico ocorre devido ao acoplamento de dois poços simples idênticos.

Poço Simples				
V_0 (eV)	50,000	100,000	130,618	300,000
Níveis de Energia (eV)	22,191	25,924	27,147	30,287
		93,883	102,809	119,600
				258,614

Tabela 4.1. Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço simples.

Poço Duplo Simétrico			
V_0 (eV)	50,000	100,000	300,000
Níveis de Energia (eV)	21,342	25,755	30,287
	23,134	26,099	30,292
		91,573	119,538
		98,689	119,663
			257,428
			259,925

Tabela 4.2. Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço duplo simétrico.

Tendo em vista os valores das energias mostrado na tabela (4.2) e usando a fórmula de Rabi (3.25), o tempo de tunelamento foi calculado através da expressão (3.26). Os valores obtidos são apresentados na tabela (4.3).

Tempo de Tunelamento no Poço Simétrico			
V_0 (eV)	50,000	100,000	300,000
T_0 (10^{-15} s)	1,555	6,014	413,800

Tabela 4.3. Relação entre o potencial e o tempo de tunelamento.

Como se está mantendo constantes os parâmetros a e L nota-se uma diminuição no tempo de transição quando a profundidade do poço decresce, tornando o tunelamento favorável.

Conclui-se que, para $E \ll V_0$ a ocorrência de tunelamento é pequena; mas, quando $E \approx V_0$, a possibilidade de tunelamento é grande, sendo evidente que o elétron pode penetrar na barreira com relativa facilidade [10].

Para obter a probabilidade de transição em função do tempo $P_{12}(t)$ é necessário saber qual é o valor da perturbação W_{12} , que é calculada através da expressão (3.15), efetuando a diferença entre E_+ e E_- , que são valores já conhecidos.

Complementando o estudo do poço simétrico é apresentada no sexto capítulo uma análise da dependência dos níveis de energia com os parâmetros geométricos deste poço. Verifica-se que o tunelamento é favorável quando a largura da barreira diminui, ou a distância entre os poços diminui, ou a profundidade dos poços diminui ou a largura dos poços aumenta, considerando que na variação de um parâmetro os demais permanecem constantes.

Capítulo 5

Poço duplo quadrado unidimensional assimétrico

5.1 - Descrição:

A finalidade neste capítulo é analisar a solução do problema de um potencial de poço duplo quadrado unidimensional e assimétrico. Serão obtidas equações transcendentais, tanto para $E < V_1$ como para $E > V_1$, onde V_1 é a profundidade máxima da barreira existente entre os dois poços. A resolução destas equações é feita graficamente, fornecendo os autovalores da energia conforme os parâmetros do potencial utilizados. Verifica-se, também, que sob condições apropriadas obtém-se as soluções determinadas no capítulo anterior. Esta equivalência constitui um teste de consistência das soluções encontradas.

5.2 - Solução da equação de Schrödinger para o poço duplo assimétrico:

O potencial $V(x)$ a ser estudado é constituído por dois poços de profundidade distintos, separados por uma barreira de potencial. Ele pode ser descrito por:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \rightarrow |x| > (L+a)/2 \\ (V_1 - V_0) & \rightarrow -(L+a)/2 < x < -(L-a)/2 \\ V_1 & \rightarrow -(L-a)/2 < x < (L-a)/2 \\ 0 & \rightarrow (L-a)/2 < x < (L+a)/2 \end{cases} \quad (5.1)$$

A figura (5.1) a seguir representa este potencial. Nesta figura existem cinco regiões indicadas pelos números romanos de I a V; e caracterizada por uma barreira de potencial V_0 situada à esquerda da região III e outra de potencial V_1 localizada à direita da região III. Esta região separa os poços da região II e IV onde o potencial é, respectivamente, $V_1 - V_0$ e nulo; nos extremos opostos destes poços, nas regiões I e V, o potencial é infinito. Dada a geometria usada, é estabelecida a condição de que $a < L$, e $V_1 > V_0$ para o poço em questão.

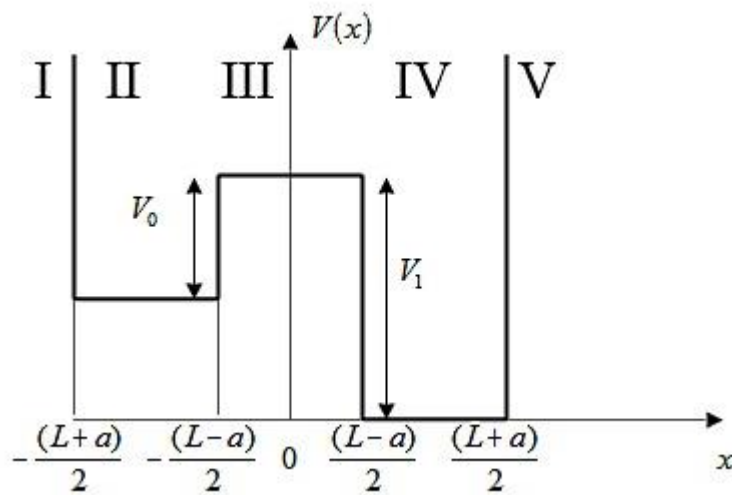


Figura 5.1. Representação do potencial $V(x)$ do poço assimétrico.

Observa-se na figura (5.1) que a região I é caracterizada para valores da coordenada x tais que $x < -\frac{(L+a)}{2}$ e a região V para valores de $x > \frac{(L+a)}{2}$. Nestas regiões o potencial é infinito. A região II, é delimitada para valores de $-\frac{(L+a)}{2} < x < -\frac{(L-a)}{2}$, onde o potencial é igual a $(V_1 - V_0)$. A região III, evidencia a barreira de potencial e é delimitada para valores de

$-\frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L-a)}{2}$, onde o potencial é igual a V_1 . A região IV, é delimitada para valores de $\frac{(L-a)}{2} < x < \frac{(L+a)}{2}$, cujo potencial é nulo.

A equação de Schrödinger dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (5.2)$$

aplicada às diversas regiões, pode ser escrita como:

na região II:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (V_1 - V_0) \right] \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (5.3)$$

na região III:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1 \right] \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (5.4)$$

e na região IV:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (5.5)$$

O problema consiste em resolver a equação de Schrödinger para o potencial estudado. Em relação às energias envolvidas, o problema pode ser dividido em dois casos, a saber: $E > V_1$ e $E < V_1$.

5.2.1 - A energia total menor que o potencial ($E < V_1$):

Quando a energia do sistema é menor que a barreira de potencial V_1 , a solução do problema é dada por:

regiões I e V:

$$\Psi(x) = 0, \quad (5.6)$$

região II:

$$\Psi(x) = A_1 \sin k_1 x + A_2 \cos k_1 x, \quad (5.7)$$

região III:

$$\Psi(x) = B e^{\beta x} + C e^{-\beta x}, \quad (5.8)$$

e região IV:

$$\Psi(x) = D_1 \sin k_2 x + D_2 \cos k_2 x, \quad (5.9)$$

onde; por simplicidade, usou-se a notação:

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}}; k_1 = \sqrt{\frac{2m[E - (V_1 - V_0)]}{\hbar^2}}; k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} . \quad (5.10)$$

Nas regiões I e V a função de onda é nula porque o potencial é infinito ($V(x) \rightarrow \infty$) nestas regiões. Também, devido a este fato tem-se que $\Psi\left[-\frac{(L+a)}{2}\right] = \Psi\left[\frac{(L+a)}{2}\right] = 0$.

Com o mesmo procedimento feito no capítulo anterior, por simplificação dos índices é assumido que $A_1 = A$ e $D_1 = D$. Devido ao cosseno não se anular no segundo termo das expressões (5.7) e (5.9) quando aplicado as condições de contorno é necessário fazer $A_2 = D_2 = 0$; ou seja, a solução (5.7) passa a ser:

$$\Psi(x) = A \sin k \left[x + \frac{1}{2}(L+a) \right] , \quad (5.11)$$

e a solução (5.9) torna-se:

$$\Psi(x) = D \sin k \left[x - \frac{1}{2}(L+a) \right] . \quad (5.12)$$

As funções de onda e suas derivadas são contínuas nos pontos $x = \pm \frac{(L-a)}{2}$, envolvendo as seguintes condições de contorno:

$$B e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = A \sin k_1 a, \quad (5.13)$$

$$B \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = A k_1 \cos k_1 a, \quad (5.14)$$

$$B e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} + C e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = -D \sin k_2 a, \quad (5.15)$$

$$B \beta e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}} - C \beta e^{\frac{\beta(L-a)}{2}} = D k_2 \cos k_2 a. \quad (5.16)$$

A continuidade da função de onda nos pontos considerados é descrita pelas equações (5.13) e (5.15), enquanto a continuidade das derivadas destas funções nos pontos em questão é representada pelas equações (5.14) e (5.16).

De (5.13), isolando A e substituindo em (5.14); tem-se que:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta + k_1 \cot k_1 a) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta - k_1 \cot k_1 a) e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}}. \quad (5.17)$$

Por outro lado, isolando D em (5.15) e substituindo em (5.16); obtém-se que:

$$\frac{B}{C} = \frac{(\beta - k_2 \cot k_2 a) e^{-\frac{\beta(L-a)}{2}}}{(\beta + k_2 \cot k_2 a) e^{\frac{\beta(L-a)}{2}}} . \quad (5.18)$$

Assim, de (5.17) e (5.18), chega-se:

$$\frac{(\beta + k_1 \cot k_1 a) e^{\beta(L-a)}}{(\beta - k_1 \cot k_1 a)} = \frac{(\beta - k_2 \cot k_2 a) e^{-\beta(L-a)}}{(\beta + k_2 \cot k_2 a)} . \quad (5.19)$$

Esta equação transcendental proporciona a determinação dos autovalores da energia, para o caso em que as energias envolvidas são menores que a barreira de potencial V_1 .

5.2.2 - A energia total maior que o potencial ($E > V_1$):

Quando a energia do sistema é maior que a barreira de potencial V_1 , a solução do problema é dada por:

regiões I e V:

$$\Psi(x) = 0 , \quad (5.20)$$

região II:

$$\Psi(x) = A_1 \sin k_1 x + A_2 \cos k_1 x, \quad (5.21)$$

região III:

$$\Psi(x) = B \sin \beta x + C \cos \beta x, \quad (5.22)$$

região IV:

$$\Psi(x) = D_1 \sin k_2 x + D_2 \cos k_2 x, \quad (5.23)$$

onde; usou-se a notação:

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}}; k_1 = \sqrt{\frac{2m[E - (V_1 - V_0)]}{\hbar^2}}; k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (5.24)$$

Com raciocínio análogo ao feito no caso anterior, chega-se:

$$\frac{\beta \tan \left[-\frac{\beta(L-a)}{2} \right] + k_1 \cot k_1 a}{\beta - k_1 \tan \left[-\frac{\beta(L-a)}{2} \right] \cot k_1 a} = \frac{\beta \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right] - k_2 \cot k_2 a}{\beta + k_2 \tan \left[\frac{\beta(L-a)}{2} \right] \cot k_2 a}. \quad (5.25)$$

Esta equação transcendental proporciona a determinação dos autovalores da energia, para o caso em que as energias envolvidas são maiores que a barreira de potencial V_1 .

5.3 - Redução da solução encontrada àquela do potencial de poço duplo simétrico:

Quando $k = k_1 = k_2$, ou seja $V_0 = V_1$, o poço duplo assimétrico recai no caso do poço duplo simétrico. Para $E < V_1$, da expressão (5.19) chega-se na equação (4.19), que é descrita

por: $\frac{(\beta + k \cot k a)}{(\beta - k \cot k a)} = \pm e^{-\beta(L-a)}$; e para $E > V_1$, a expressão (5.25) resulta nas equações

$$(4.26.a) \text{ e } (4.26.b), \text{ que é descrita por: } k \cot k a = \beta \tan \left[\frac{\beta (L-a)}{2} \right] = -\beta \cot \left[\frac{\beta (L-a)}{2} \right].$$

No limite em que os autovalores de energia são muito maiores que a altura da barreira de potencial V_1 , tem-se que: $\beta \approx k = k_1 = k_2$, e nestas condições a expressão (5.25) fornece o mesmo resultado do poço infinito.

Estas análises evidenciam a consistência da solução obtida para o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico.

Por outro lado, se for efetuada uma separação espacial dos poços, observa-se como consequência o surgimento de dois poços quadrados unidimensionais finitos em um dos extremos, cujas características são tratadas no apêndice D.

5.4 - Resultados numéricos:

A exemplo do realizado no capítulo anterior, estudou-se um sistema composto de um elétron sujeito a um potencial com diferentes valores de V_0 e V_1 para determinação dos autovalores da energia e do tempo de tunelamento, tanto para o caso ressonante como para o não ressonante. No caso ressonante um nível de energia de um dos poços apresenta a mesma profundidade de um nível de energia do outro poço, proporcionando maior probabilidade de

tunelamento, e devido à ressonância a partícula pode ficar oscilando entre os poços. Entretanto, no caso não ressonante isto não ocorre, pois os níveis de energia de cada poço não estão na mesma profundidade e não há ressonância.

Utilizou-se, inicialmente, para a largura dos poços e a distância entre eles, respectivamente, os valores: $a = 1 \times 10^{-10}$ m, e $L = 2 \times 10^{-10}$ m.

Na tabela (5.1) são apresentados os valores obtidos para os níveis de energia em função dos valores das profundidades dos poços, V_0 e V_1 , para o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico, considerando $E < V_1$.

Poço Duplo Assimétrico			
Potenciais (eV) V_0 e V_1	50,000 e 100,000	50,000 e 130,618	50,000 e 300,000
Níveis de Energia (eV)	25,924	27,147	30,290
	72,160	101,685	119,590
	94,632	104,120	258,556
			272,364

Tabela 5.1. Relação entre o potencial e os níveis de energia no poço duplo assimétrico.

Na tabela (5.1) nota-se que para um determinado valor da barreira de potencial, cada autovalor da energia no poço simples, conforme tabela (4.1) do capítulo anterior, produz dois autovalores distintos de energia no poço duplo assimétrico; mas, o valor médio não é coincidente com aquele encontrado no poço simples. Este resultado difere do obtido para o poço duplo simétrico por causa da assimetria dos poços, ou seja, as profundidades dos poços não são iguais.

Contudo, nota-se um fato proposto por Landau [8], quando dois níveis de mesma energia, ou seja, localizados na mesma profundidade do poço duplo, e cada nível situado em cada um dos poços, verifica-se a ocorrência de um desdobramento destes níveis, duplicando-os. O tunelamento torna-se mais propício quanto maior for a abertura desta duplicação; sendo que ela é mais evidente para níveis duplicados mais elevados, ou seja, mais próximos do topo da barreira de potencial. Este desdobramento é produzido por funções de onda que podem ser aproximadas através de uma combinação linear, simétrica e antissimétrica, das autofunções originais. Assim, o potencial biestável pode ser formado por intermédio da junção de dois poços simples, sendo que a distribuição de energia é cada vez mais relevante à medida que os poços são aproximados.

Verifica-se, também, no poço assimétrico que a transição entre os estados inicial e final é mais rápida quando a diferença de energia $(E_+ - E_-)$ aumenta, tornando favorável o tunelamento; mas, dependendo se o caso é ou não ressonante. No caso ressonante há correspondência dos níveis de energia, propiciando a oscilação da partícula entre os poços; no caso não ressonante tal fato não ocorre e o tunelamento é desfavorecido. O tunelamento é favorecido quando há estado ressonante, que corresponde ao estado excitado. Nota-se que o estado fundamental está localizado apenas num dos lados do poço duplo, esta região está situada no lado do poço com profundidade maior e, devido à assimetria, não possui correspondente no poço de profundidade menor, portanto, esta situação não permite o tunelamento.

Tendo em vista os valores das energias mostrado na tabela (5.1) e usando a fórmula de Rabi (3.25), o tempo de tunelamento foi calculado através da expressão (3.26). Os valores encontrados são apresentados na tabela (5.2). Observa-se que este tempo é menor que aquele encontrado no poço duplo simétrico (vide capítulos 4 e 6), se for considerado os dois primeiros níveis de energia que se desdobraram.

Tempo de Tunelamento no Poço Assimétrico Ressonante	
Potenciais V_0 e V_1 (eV)	50,000 e 130,618
T_0 (10^{-16} s)	8,497

Tabela 5.2. Relação entre o potencial e o tempo de tunelamento.

Foi analisada, também, no caso ressonante para $V_0 = 50$ eV e $V_1 = 130,618$ eV, a variação de energia $\Delta\varepsilon$ em função da razão entre a distância L entre os poços e a largura a dos poços, sendo $\Delta\varepsilon$ a diferença entre os dois autovalores de energia E_+ e E_- . Esse resultado é mostrado na figura (5.2), observa-se um valor máximo de $\Delta\varepsilon$ em torno de 39,45 eV, quando L/a é aproximadamente maior que 1.

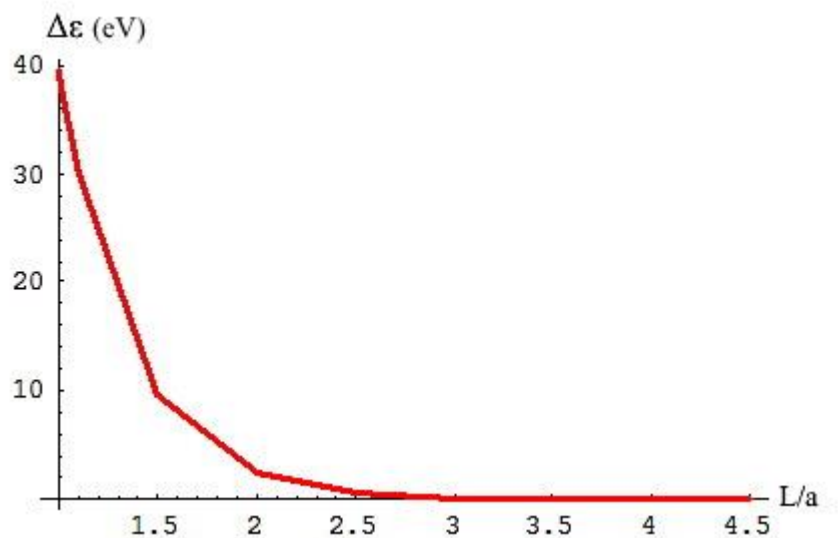


Figura 5.2. Variação de energia $\Delta\varepsilon$ x a razão da distância L e a largura a dos poços.

Nota-se no caso não ressonante a ocorrência de um fraco acoplamento e a probabilidade de tunelamento é pequena, justamente devido à ausência de ressonância.

Se for efetuada uma separação espacial dos poços observa-se o surgimento de dois poços quadrados unidimensionais finitos em um dos extremos. O potencial simples é estudado no apêndice D.

No apêndice E são mostrados os autovalores da energia para diferentes valores das profundidades dos poços (V_0 e V_1). Estes autovalores são obtidos por intermédio de gráficos usando a equação transcendental (5.19) e para $E < V_1$.

Capítulo 6

Dependência dos Níveis de Energia com os Parâmetros Geométricos do Poço

6.1 - Descrição:

Objetivando uma melhor compreensão do problema do poço duplo simétrico é efetuado neste capítulo um estudo da dependência dos níveis de energia E_n e do tempo de tunelamento em termos dos parâmetros geométricos do potencial.

Os parâmetros analisados no poço duplo simétrico foram a largura a e profundidade V_0 ; e, também, a largura da barreira $(L - a)$, sendo L a distância entre os pontos médios dos dois poços em relação ao eixo x (vide figura 4.1 do capítulo 4).

Observa-se entre outras propriedades que se for diminuída a largura da barreira o tunelamento torna-se favorável; e, inversamente, ele perde eficácia quando ocorrer um aumento da largura da barreira. Na sequência, são analisados os resultados caracterizados pela modificação dos parâmetros inerentes ao poço duplo simétrico.

6.2 - Variação do parâmetro L :

Mantendo fixos a profundidade V_0 e a largura a do poço duplo, e variando L , pode-se aumentar ou diminuir a largura da barreira; consequentemente, o tunelamento pode ser alterado. Foi atribuído para a o valor de 1×10^{-10} m e para V_0 o valor de $8,010 \times 10^{-18}$ J. Na tabela (6.1)

tem-se a relação entre o tempo de tunelamento T_0 e a distância L do poço simétrico; sendo T_0 o tempo de tunelamento para o estado fundamental.

Evolução do tempo de tunelamento em função de L			
L (10^{-10} m)	1,5	2	2,5
Níveis de Energia (eV)	$E_1 = 19,032$	$E_1 = 21,342$	$E_1 = 21,966$
	$E_2 = 26,092$	$E_2 = 23,134$	$E_2 = 22,434$
T_0 (10^{-15} s)	0,293	1,155	4,421

Tabela 6.1. O tempo de tunelamento T_0 em função da distância L do poço simétrico.

Através dos dados obtidos da tabela (6.1) pode-se concluir que se o valor do parâmetro L diminui, mantendo os demais parâmetros constantes, a largura da barreira diminui. Nestas condições, a diferença entre E_+ e E_- aumenta levando a um tempo de tunelamento T_0 menor, conforme a expressão (3.26). Portanto, a passagem de uma partícula pela barreira nesta ocasião é mais rápida e o tunelamento mais efetivo.

Quando L for muito grande ($L \gg 0$), verifica-se no poço duplo simétrico que E_+ é igual a E_- , que por sua vez ambos são iguais a E no poço simples, devido à ocorrência do afastamento dos poços.

6.3 - Variação do parâmetro a :

Agora, mantendo fixos a profundidade V_0 e a distância L dos poços, e variando a largura a dos mesmos, pode-se aumentar ou diminuir a largura da barreira; consequentemente, o tunelamento neste caso, também, pode ser alterado.

Foi estabelecido para L o valor de 2×10^{-10} m e para V_0 o valor de $8,010 \times 10^{-18}$ J.

Na tabela (6.2) tem-se a relação entre o tempo de tunelamento T_0 e a largura a do poço simétrico.

Evolução do tempo de tunelamento em função de a				
a (10^{-10} m)	1	1,2	1,5	1,8
Níveis de Energia (eV)	$E_1 = 21,342$	$E_1 = 15,949$	$E_1 = 10,468$	$E_1 = 6,155$
	$E_2 = 23,134$	$E_2 = 17,809$	$E_2 = 13,021$	$E_2 = 10,499$
	-	-	$E_3 = 40,549$	$E_3 = 28,414$
	-	-	$E_4 = 46,504$	$E_4 = 41,698$
T_0 (10^{-15} s)	1,155	1,112	0,810	0,476

Tabela 6.2. O tempo de tunelamento T_0 em função da largura a do poço simétrico.

Por intermédio dos dados fornecidos pela tabela (6.2) pode-se concluir que se o valor do parâmetro a aumenta, mantendo os demais parâmetros inalterados, a partícula atravessa a barreira em um tempo menor; ou seja, o tunelamento é favorecido. Isto ocorre pois efetivamente o aumento de a implica que a largura da barreira diminui.

Um aspecto interessante que pode ser notado, é quando o valor do parâmetro a cresce, ocorre um incremento de novos níveis de energia no poço duplo simétrico; e, também, surge

uma diminuição no valor dos níveis de energia existentes. Este fenômeno pode ser exemplificado através da sequência das figuras (6.1), (6.2), (6.3) e (6.4) mostradas a seguir; onde são indicadas as soluções gráficas das equações transcendentais (4.20.a) e (4.20.b) vistas no capítulo 4. A curva “vermelha” representa o lado esquerdo da equação (4.20.a) e (4.20.b), enquanto a curva “verde” representa o lado direito da equação (4.20.a) e a curva “azul” representa o lado direito da equação (4.20.b). Nas figuras (6.1) e (6.2) observa-se dois níveis de energia, ao passo que nas figuras (6.3) e (6.4) são apresentados quatro níveis de energia, onde apenas o parâmetro a foi modificado. E comparando estas figuras, fica revelada a tendência das curvas se interceptarem precocemente, diminuindo os autovalores da energia quando é elevado o valor do parâmetro a .

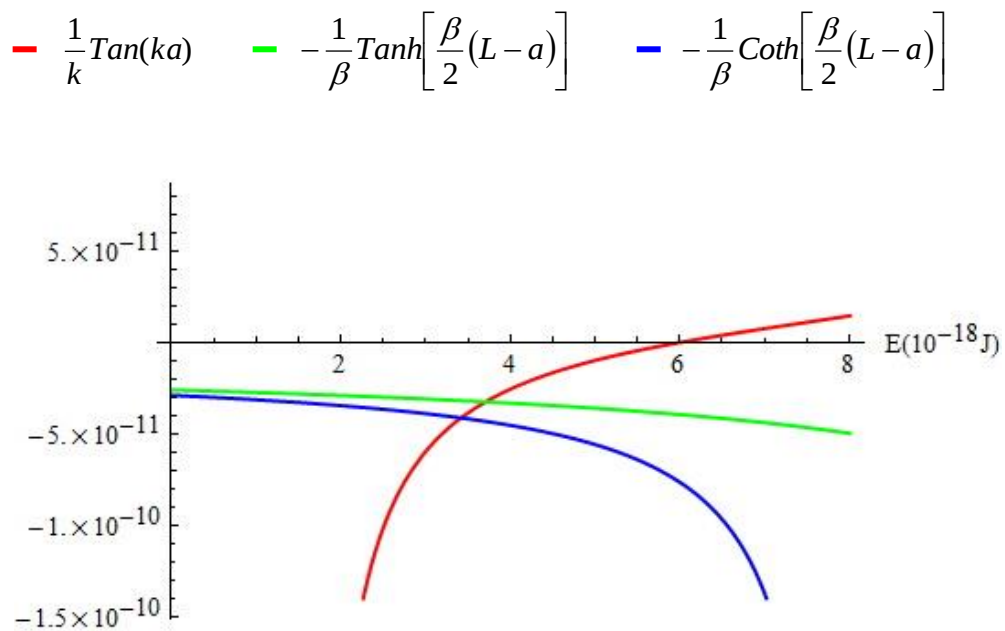


Figura 6.1. Dois níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1 \times 10^{-10}$ m.

$$\text{---} \frac{1}{k} \tan(ka) \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right] \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \coth\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right]$$

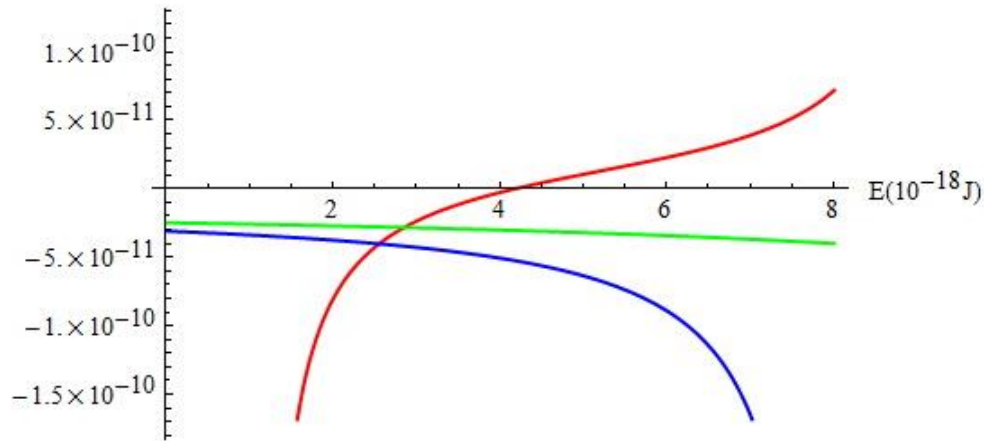


Figura 6.2. Dois níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,2 \times 10^{-10}$ m.

$$\text{---} \frac{1}{k} \tan(ka) \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right] \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \coth\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right]$$

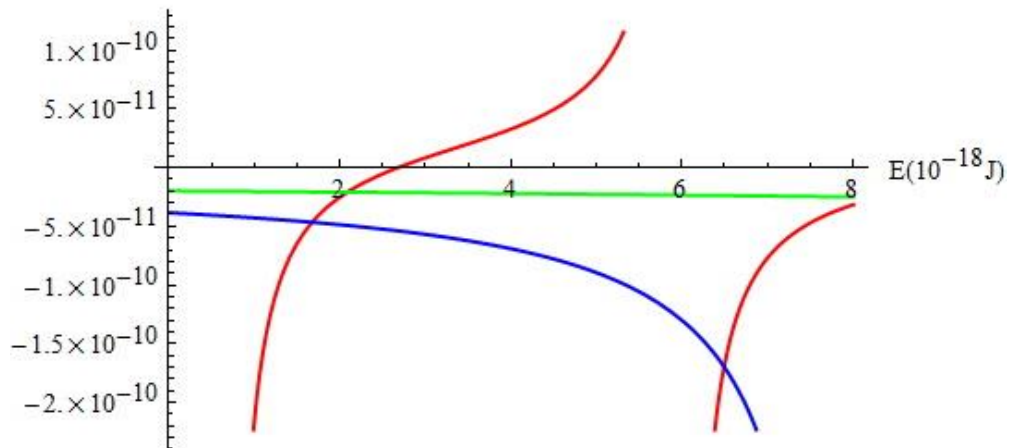


Figura 6.3. Quatro níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,5 \times 10^{-10}$ m.

$$\text{---} \frac{1}{k} \tan(ka) \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right] \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \coth\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right]$$

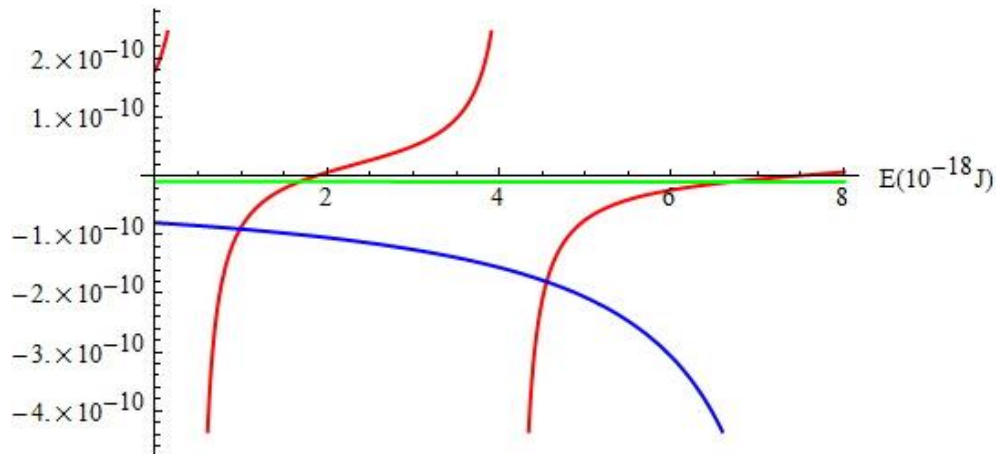


Figura 6.4. Quatro níveis de energia devido às intersecções das curvas para $a = 1,8 \times 10^{-10}$ m.

O fato dos níveis de energia baixarem quando se aumenta o valor do parâmetro a indica que mantendo a largura da barreira constante e deixando os poços mais largos, os autovalores da energia tendem a ser menores e a diferença entre E_+ e E_- diminui, desfavorecendo o tunelamento. Níveis menos profundos levam a tempos de tunelamentos menores, como indicado no item (6.4).

No poço duplo simétrico cada poço possui a mesma largura a , entretanto uma análise utilizando larguras diferentes para cada poço pode ser vista na referência [20].

6.4 - Variação dos parâmetros a e L :

Foi analisada a variação dos valores de a e L , mantendo constantes a profundidade V_0 e a largura da barreira dos poços. Foi utilizado para L o valor de 2×10^{-10} m e para a o valor de 1×10^{-10} m.

Na tabela (6.3) é mostrado os tempos de tunelamento do estado fundamental e do primeiro estado excitado.

a (10^{-10} m)	1,2	1,5	1,8
L (10^{-10} m)	2,2	2,5	2,8
Níveis de Energia (eV)	$E_1 = 16,342$	$E_1 = 11,504$	$E_1 = 8,502$
	$E_2 = 17,372$	$E_2 = 12,035$	$E_2 = 8,814$
	-	$E_3 = 41,985$	$E_3 = 32,341$
	-	$E_4 = 47,753$	$E_4 = 34,700$
T_0 (10^{-15} s)	2,009	3,896	6,631
T_1 (10^{-15} s)	-	0,358	0,877

Tabela 6.3. O tempo de tunelamento T_0 e T_1 em função da largura a e L do poço simétrico.

Na tabela (6.3) com aumento dos parâmetros a e L , mantendo a largura da barreira e a profundidade dos poços, o tempo de tunelamento é menos rápido.

6.5 - Variação do parâmetro V_0 :

Outro parâmetro analisado foi a profundidade do poço indicado pelo valor de V_0 . Alterando seu valor, com os demais parâmetros permanecendo fixos, o tunelamento, também, é modificado. Foi utilizado para L o valor de 2×10^{-10} m e para a o valor de 1×10^{-10} m.

Na tabela (6.4) tem-se a relação entre o tempo de tunelamento T_0 , T_1 e T_2 com o potencial V_0 do poço simétrico, sendo T_0 o tempo de tunelamento devido à duplicação do estado

fundamental, T_1 o tempo de tunelamento devido à duplicação do primeiro estado excitado e T_2 o tempo de tunelamento devido à duplicação do segundo estado excitado quando este existir.

Evolução do tempo de tunelamento em função de V_0			
V_0 (eV)	50,000	100,000	300,000
Níveis de Energia (eV)	$E_1 = 21,342$	$E_1 = 25,755$	$E_1 = 30,287$
	$E_2 = 23,134$	$E_2 = 26,099$	$E_2 = 30,292$
	-	$E_3 = 91,573$	$E_3 = 119,538$
	-	$E_4 = 98,689$	$E_4 = 119,663$
	-	-	$E_5 = 257,428$
	-	-	$E_6 = 259,925$
T_0 (10^{-15} s)	1,155	6,014	413,780
T_1 (10^{-15} s)	-	0,291	16,551
T_2 (10^{-15} s)	-	-	0,829

Tabela 6.4. O tempo de tunelamento T_0 , T_1 e T_2 em função da profundidade do poço V_0 .

Por meio dos dados que a tabela (6.4) apresenta, pode-se concluir que ao aumentar o potencial V_0 , isto é, a profundidade da barreira do poço simétrico, verifica-se que o tunelamento no estado fundamental torna-se menos favorável. Agora, quanto maior for o nível de energia E_n , e considerando $E_n < V_0$, nota-se um acréscimo da probabilidade de transição de um poço para o outro. Então, no primeiro estado excitado uma partícula efetua o tunelamento com maior rapidez do que estando no estado fundamental, para um mesmo potencial V_0 .

Estas observações estão de acordo com o esperado, no que diz respeito à transposição de um poço para outro. Uma partícula que está mais próxima do topo da barreira tem probabilidade maior de tunelamento [1,10].

Capítulo 7

Oscilação entre dois estados discretos na presença de uma perturbação

7.1 - Descrição:

Estuda-se neste capítulo o comportamento oscilante de um sistema entre dois estados discretos sobre o efeito de uma perturbação ressonante senoidal. Nota-se que o método de aproximação usado para calcular o efeito de uma perturbação ressonante não é válida para longos períodos de tempo. No segundo capítulo a expressão (2.48) descreve que o tempo t que mais satisfaz é:

$$t \ll \frac{\hbar}{|W_{fi}|} . \quad (7.1)$$

Supondo que ao estudar a evolução de um sistema sujeito a uma perturbação ressonante sobre um tempo considerável, na qual a condição (7.1) não é satisfeita, verifica-se que a solução de primeira ordem é insuficiente, havendo a necessidade de utilizar um certo número de termos de ordem superior para obter a probabilidade de transição $P_{if}^*(t; \omega)$, sendo descrita por:

$$P_{if}^*(t; \omega) = \left| \lambda b_f^{(1)}(t) + \lambda^2 b_f^{(2)}(t) + \lambda^3 b_f^{(3)}(t) + \dots \right|^2 . \quad (7.2)$$

A seguir é aplicado um método de aproximação para a natureza ressonante da perturbação.

7.2 - O método da aproximação secular:

A condição de ressonância implica que a frequência de oscilação da perturbação seja aproximadamente igual a frequência de Bohr ($\omega \cong \omega_{fi}$), considerando que haja dois estados discretos $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$ que estão efetivamente associados à perturbação $W(t)$. E que o sistema no instante inicial esteja no estado $|\varphi_i\rangle$ ($b_i(0)=1$), é possível ocorrer uma amplitude de probabilidade $b_f(t)$ de encontrá-lo no estado $|\varphi_f\rangle$ num tempo t . Por outro lado, todos os coeficientes $b_n(t)$ (com $n \neq i, f$) permanecem muito menores que 1 desde que eles não satisfaçam a condição de ressonância.

Sendo a perturbação dada por (2.31), ou seja: $\hat{W}(t) = \hat{W} \sin \omega t$, e através da expressão (2.17): $i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{i\omega_{nk}t}$, é possível determinar $b_i(t)$ e $b_f(t)$ para $t = 0$ e com $k \neq i, f$; cujo sistema de equações é descrito por:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) = \frac{1}{2i} \left\{ [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ii} b_i(t) + [e^{i(\omega - \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega + \omega_{fi})t}] W_{if} b_f(t) \right\}, \quad (7.3)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_f(t) = \frac{1}{2i} \left\{ [e^{i(\omega + \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega - \omega_{fi})t}] W_{fi} b_i(t) + [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ff} b_f(t) \right\}.$$

No lado direito destas equações, alguns coeficientes de $b_i(t)$ e $b_f(t)$ são proporcionais à $e^{\pm i(\omega - \omega_{\tilde{f}})t}$, deste modo eles oscilam lentamente no tempo quando $\omega \cong \omega_{\tilde{f}}$. Por outro lado, os demais coeficientes são proporcionais à $e^{\pm i\omega t}$ ou à $e^{\pm i(\omega + \omega_{\tilde{f}})t}$ que oscilam mais rapidamente. Aqui, aplica-se a aproximação secular, na qual consiste em omitir o segundo tipo de termos. Os termos restantes são denominados “termos seculares”, cujos coeficientes tornam-se constantes para $\omega = \omega_{\tilde{f}}$. Quando integrados sobre o tempo, eles contribuem às variações das componentes $b_i(t)$ e $b_f(t)$. A aproximação secular é válida tanto para $\omega = \omega_{\tilde{f}}$ como para $\omega \neq \omega_{\tilde{f}}$, ela conduz ao sistema de equações descrito por:

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = -\frac{1}{2\hbar}e^{i(\omega - \omega_{\tilde{f}})t}W_{if}b_f(t) , \quad (7.4.a)$$

$$\frac{d}{dt}b_f(t) = \frac{1}{2\hbar}e^{-i(\omega - \omega_{\tilde{f}})t}W_{\tilde{f}i}b_i(t) . \quad (7.4.b)$$

7.3 - Solução do sistema de equações:

Considerando, inicialmente, o caso ressonante no qual $\omega = \omega_{\tilde{f}}$, diferenciando a equação (7.4.a) e substituindo em (7.4.b) resulta em:

$$\frac{d^2}{dt^2}b_i(t) = -\frac{1}{4\hbar^2}|W_{\tilde{f}i}|^2b_i(t) . \quad (7.5)$$

Desde que o sistema esteja no estado $|\varphi_i\rangle$ para $t = 0$, as condições iniciais são:

$$b_i(0) = 1 \quad , \quad (7.6.a)$$

$$b_f(0) = 0 \quad , \quad (7.6.b)$$

que de acordo com (7.4-a) e (7.4-b) resulta:

$$\left. \frac{db_i}{dt} \right|_{t=0} = 0 \quad , \quad (7.7.a)$$

$$\left. \frac{db_f}{dt} \right|_{t=0} = \frac{W_{fi}}{2\hbar} \quad . \quad (7.7.b)$$

A solução de (7.5) que satisfaz (7.6-a) e (7.7-a) pode ser escrita da seguinte forma:

$$b_i(t) = \cos\left(\frac{|W_{fi}|t}{2\hbar}\right) \quad , \quad (7.8.a)$$

e $b_f(t)$ pode ser obtido de (7.4-a):

$$b_f(t) = e^{-i(\omega - \omega_{\hat{f}})t} \operatorname{sen} \left(\frac{|W_{\hat{f}}|t}{2\hbar} \right), \quad (7.8.b)$$

A probabilidade $P_{if}^*(t; \omega = \omega_{\hat{f}})$ de encontrar o sistema no estado $|\varphi_f\rangle$ num tempo t é dada por:

$$P_{if}^*(t; \omega = \omega_{\hat{f}}) = \operatorname{sen}^2 \left(\frac{|W_{\hat{f}}|t}{2\hbar} \right). \quad (7.9)$$

Quando $\omega \neq \omega_{\hat{f}}$, a probabilidade é descrita por:

$$P_{if}^*(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{\hat{f}})^2} \operatorname{sen}^2 \left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{\hat{f}})^2} \frac{t}{2} \right]. \quad (7.10)$$

A equação (7.10) fornece a magnitude do fenômeno de ressonância. Quando $\omega = \omega_{\hat{f}}$, a perturbação faz com que o sistema mova completamente do estado $|\varphi_i\rangle$ ao estado $|\varphi_f\rangle$. Por outro lado, se a perturbação não é ressonante a probabilidade $P_{if}^*(t; \omega)$ sempre permanece menor que 1.

7.4 - Probabilidade de transição e de tunelamento em processos fotossintéticos:

A fotossíntese é um processo biológico pelo qual a energia eletromagnética é convertida em energia química. A vida na terra depende da fotossíntese que é realizada por duas classes principais de organismos: aqueles que envolvem o oxigênio, por exemplo, plantas verdes e as bactérias fotossintéticas.

A determinação da estrutura cristalina dos centros de reação em bactérias, tais como: *Rhodobacter sphaeroides* e *Rhodopseudomonas viridis* forneceu uma base para a compreensão quantitativa da transferência primária de elétrons nos processos de fotossíntese [19].

Realizou-se uma aplicação baseada em sistemas conforme a referência [19] para obtenção da probabilidade de transição e de tunelamento. A diferença entre estas probabilidades no poço duplo é que a transição ocorre em um dos poços, enquanto que o tunelamento ocorre de um poço para outro.

Com a intenção de analisar a concorrência entre a probabilidade de transição e de tunelamento utilizou-se um poço simples de profundidade de 4 eV, com dois níveis de energia E_1 e E_2 de 0,515 eV e 2,019 eV, respectivamente, cuja diferença de aproximadamente 1,5 eV caracterizando a energia de absorção de um fóton. Um outro poço simples de 6,733 eV com três níveis de energia E_1 , E_2 e E_3 de 0,545 eV; 2,159 eV e 4,752 eV, respectivamente, foi acoplado ao anterior gerando um poço duplo assimétrico ressonante. Esta situação é satisfeita quando a largura dos poços a é igual a $7,55 \times 10^{-10}$ m e a distância entre eles L é igual a 1×10^{-9} m. A profundidade de cada poço vale $V_0 = 4$ eV e $V_1 = 6,733$ eV. O potencial biestável resultante produziu cinco níveis de energia que são: 0,544 eV; 2,158 eV; 3,204 eV; 4,614 eV e 4,868 eV.

Nesta circunstância um elétron ao passar de um poço para outro sofre a influência de uma perturbação W_{12} , podendo ser calculada através da expressão (3.15), efetuando a diferença entre E_+ e E_- . Neste caso os níveis de energia E_+ e E_- são, respectivamente, 4,868 eV e 4,614 eV, resultando numa perturbação W_{12} de módulo igual a 0,127 eV. A probabilidade de tunelamento $P_{12}(t)$ é dada pela fórmula de Rabi, ou seja:

$$P_{12}(t) = \sin^2 \left[2 |W_{12}| \frac{t}{2\hbar} \right]. \quad (7.11)$$

Logo, neste caso, tem-se:

$$P_{12}(t) = \sin^2 [3,859 \times 10^{14} t]. \quad (7.12)$$

A probabilidade de transição $P_{12}^*(t)$ é fornecida pela expressão (7.10), e neste estudo o módulo da perturbação foi considerado como sendo a energia térmica, ou seja: $|W_{if}| = k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann, e T está próxima da temperatura ambiente ($T = 300$ K). Logo, o módulo da perturbação é $W_{12} = 2,589 \times 10^{-2} \text{ eV}$. Indicando que a perturbação é gerada pela própria energia térmica do ambiente. Por outro lado, com a finalidade de seguir um modelo baseado na referência [19], aplicou-se um comprimento de onda na faixa do infravermelho em torno de $8,65 \times 10^{-7} \text{ m}$, conseqüentemente a frequência angular ω é igual a $2,178 \times 10^{15} \text{ Hz}$. A frequência de transição ω_{fi} é estabelecida pela diferença entre os dois níveis de energia do poço simples de menor profundidade dividido por $\hbar$, que é igual a $2,285 \times 10^{15} \text{ Hz}$.

Então, a probabilidade de transição $P_{12}^*(t)$ que representa a probabilidade quando $\omega \neq \omega_{fi}$ (neste caso $2,178 \times 10^{15} \text{ Hz} \neq 2,285 \times 10^{15} \text{ Hz}$), resulta em:

$$P_{12}^*(t) = 0,119 \text{sen}^2[5,697 \times 10^{13} t] . \quad (7.13)$$

Efetuando o gráfico das probabilidades $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ chega-se à figura (7.1).

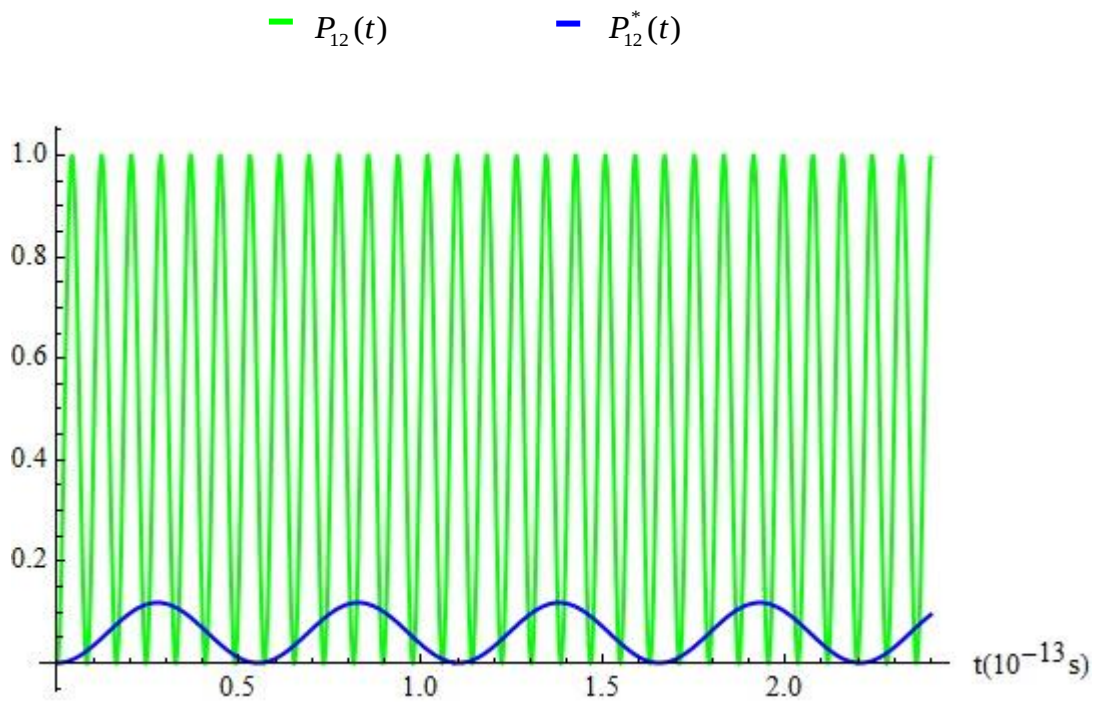


Figura 7.1. Gráfico de $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ em relação ao tempo, com $\omega \neq \omega_{fi}$.

Para um tempo t variando de 0 a $2,4 \times 10^{-13} \text{ s}$, e com $\omega \neq \omega_{fi}$, a probabilidade $P_{12}^*(t)$ não alcança o máximo.

No caso ressonante, $\omega = \omega_{fi}$, a probabilidade de transição $P_{12}^*(t)$, dada pela expressão (7.10), é escrita da seguinte forma:

$$P_{12}^*(t) = \sin^2[1,963 \times 10^{13} t] \quad (7.14)$$

O gráfico das probabilidades $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ nestas condições é mostrado na figura (7.2).

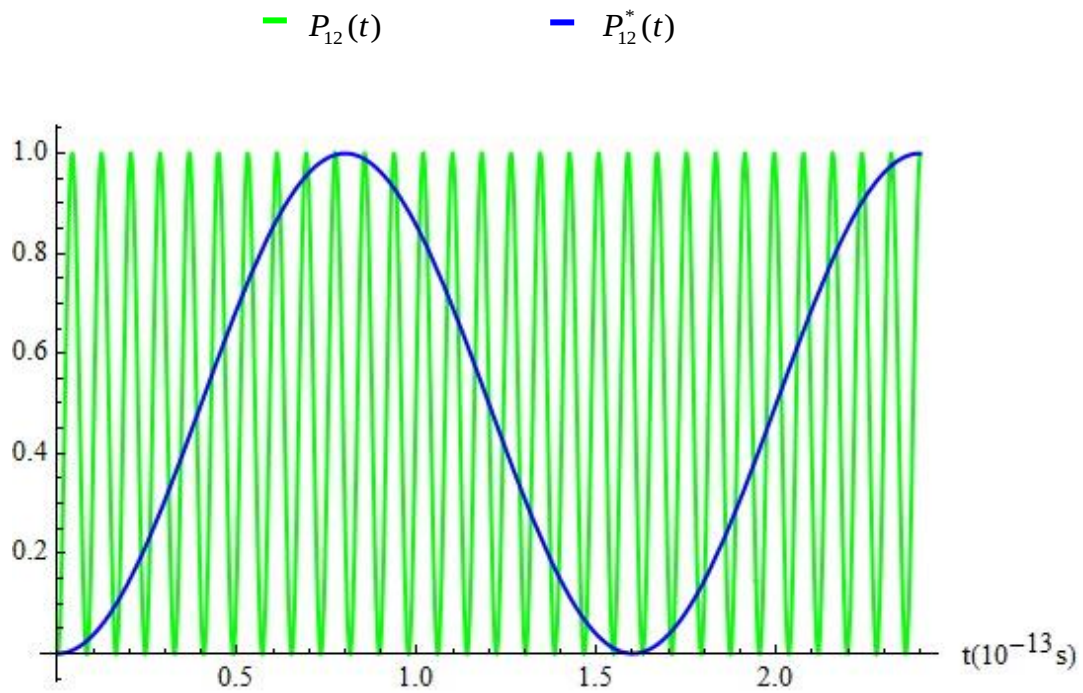


Figura 7.2. Gráfico de $P_{12}(t)$ e $P_{12}^*(t)$ em relação ao tempo t , se $\omega = \omega_{fi}$.

Para um tempo t variando de 0 a $2,4 \times 10^{-13}$ s, e com $\omega = \omega_{fi}$, a probabilidade $P_{12}^*(t)$ não alcança o máximo, alcança o máximo, mas $P_{12}(t)$ atinge-o primeiro e com maior frequência.

Observa-se na figura (7.2) que nas condições indicadas a probabilidade $P_{12}(t)$ atinge o seu máximo mais rapidamente que a probabilidade $P_{12}^*(t)$. Conclui-se neste caso que o tunelamento é mais favorável à transição de um elétron para retornar ao seu estado energético inicial.

Capítulo 8

Conclusão

Neste trabalho foram estudados sistemas de dois estados na presença de perturbação, para os quais foi observada a oscilação de um estado para outro com frequência proporcional à perturbação. Em um poço duplo simétrico ou assimétrico, quando os níveis de energia em cada poço eram iguais, ou sejam, estão situados na mesma profundidade, caracterizando um sistema ressonante, a probabilidade de tunelamento é máxima. Nestes sistemas foi obtida a probabilidade de transição possibilitando determinar o tempo de tunelamento característico.

Analizou-se a solução do problema de um potencial de poço duplo quadrado unidimensional simétrico e assimétrico, sendo obtidos os autovalores da energia, tanto para energias abaixo como acima da barreira de potencial (capítulos 4 e 5). Foi visto, também, a dependência dos níveis de energia com os parâmetros geométricos do poço duplo simétrico (capítulo 6). De acordo com o esperado verificou-se que a diminuição da largura da barreira favorece o tunelamento; e, inversamente, o tunelamento é desfavorecido quando ocorrer um aumento da largura da barreira. Notou-se que se o valor da distância entre os dois poços (parâmetro L) diminuir, mantendo os demais parâmetros constantes (a e V_0), a diferença entre E_+ e E_- sofre um aumento levando a um tempo de tunelamento T_0 menor. Logo, a passagem de uma partícula pela barreira nesta condição é mais rápida, ou seja, o tunelamento é mais efetivo. Quando o valor do parâmetro a aumenta, mantendo os demais parâmetros inalterados, a partícula atravessa a barreira em um tempo menor; ou seja, o tunelamento é favorecido. Ainda sobre o aumento do valor do parâmetro a , pôde ser visto o aparecimento de novos níveis de energia no poço duplo simétrico; assim como a diminuição dos autovalores de energia já

existentes, aproximando os níveis do fundo do poço. A variação da profundidade da barreira de potencial, também, foi analisada, verificou-se que um aumento do potencial V_0 , dificulta o tunelamento. Contudo, quanto maior for o nível de energia, desde que ainda menor que a altura da barreira de potencial, percebeu-se um acréscimo na probabilidade de transição de um poço para o outro. Então, conclui-se que no primeiro estado excitado uma partícula tem a capacidade de efetuar o tunelamento com maior rapidez do que estando no estado fundamental, para um mesmo potencial V_0 considerado. Todas estas conclusões podem ser obtidas da análise feita no sexto capítulo.

Na aproximação de dois poços simples formando um poço duplo, observou-se que para um determinado valor da barreira de potencial, cada autovalor da energia no poço simples gerou dois autovalores da energia distintos no poço duplo simétrico, cujo valor médio obtido foi próximo daquele encontrado no poço simples.

Notou-se no poço duplo ressonante a ocorrência de um desdobramento dos níveis de energia, duplicando-os em relação aos do poço simples; sendo a diferença de energia cada vez mais acentuada à medida que os poços se aproximam entre si. Este efeito reforça a ideia que o potencial biestável pode ser formado através da junção de dois poços simples. Neste caso, as funções de onda resultantes podem ser aproximadas por combinações lineares das autofunções originais, dando origem a dois níveis de energia (previsão de Landau).

No estudo do poço assimétrico esta aproximação é menos efetiva que para o poço simétrico. Isto pode ser verificado notando que a média das energias obtidas entre dois níveis próximos para o poço duplo assimétrico não corresponde ao valor do nível de energia do poço simples (tabela 5.1).

Foi possível perceber que, quanto mais próximo do topo da barreira estiverem os níveis de energia maior é a abertura entre os níveis duplicados e conclui-se que nesta situação o tunelamento é mais propício.

O trabalho apresentado aqui permite averiguar as principais características do processo de tunelamento entre dois poços de potenciais. O fato de o problema possuir solução analítica e exata da equação de Schrödinger facilita a visualização dos resultados.

Por outro lado, como visto na introdução o tunelamento tem inúmeras aplicações em sistemas físicos, dentre as quais destaca-se a transferência de elétrons em sistemas biológicos (capítulo 7).

Dados experimentais de transferência fotossintética de elétrons em bactérias mostram que a taxa de transferência tem uma forte dependência com a temperatura até um valor crítico ($T_C = 100$ K, no caso da oxidação fotoinduzida no citocromo de *Rhodospseudomonas*) [2].

Para valores menores que T_C a taxa passa a ser constante indicando que a causa mais provável da transferência nesta faixa de temperatura é devido ao tunelamento quântico, pois nesta situação a taxa de transferência torna-se independente da temperatura.

Verificou-se que a probabilidade de tunelamento alcançou o seu máximo com maior rapidez do que a probabilidade de transição (figura 7.2). Conclui-se nesta situação que a transição de um elétron para retornar ao seu estado energético inicial é menos favorável que o tunelamento.

E ainda na figura (E.8) aparece um segundo pico na curva em verde que ao interceptar com a curva em vermelho gera o segundo nível de energia no poço duplo considerado.

Referências:

1. COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALÖE, F. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1977. 2 v.
2. DEVAULT, D. *Quantum Mechanical Tunnelling in Biological Systems*. Cambridge University Press, 1983.
3. HARMONY, M. D. Tunnelling in double-minimum potentials. *Chemical Physics Letters*, v. 10, p. 337-340, 1971.
4. BALANTEKIN, A. B.; TAKIGAWA, N. Quantum tunneling in nuclear fusion. *Reviews of Modern Physics*, v. 70, p. 77, 1998.
5. FLANIGAN, M. C.; VEGA, J. R. Motion of the proton in an asymmetric double minimum potential. *The Journal of Chemical Physics*, v. 61, p. 1882, 1974.
6. BRICKMANN, J.; ZIMMERMANN, H. Lingering Time of the Proton in the Wells of the Double-Minimum Potential of Hydrogen Bonds. *The Journal of Chemical Physics*, v. 50, p. 1608, 1969.
7. GREINER, W. *An Introduction Quantum Mechanics*. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
8. LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, M. *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*. Oxford: Pergamon Press, 1965.
9. JOHNSON, C. S.; Pedersen, L. G. *Quantum Chemistry and Physics*. New York: Dover Publications, 1986.
10. EISBERG, R. Eisberg; Resnick, R. *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.
11. GASIOROWICZ, S. *Física Quântica*. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois, 1979.

12. MÖRSCH, M.; RISKEN, H.; VOLLMER, H. D. One-dimensional diffusion in soluble model potentials. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v.32, p. 245-252, 1979.
13. FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics*. v. 3, Massachusetts: Addison-Wesley, 1965.
14. ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. S. *Molecular Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1997.
15. DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1958.
16. SCHIF, L. I. *Quantum Mechanic*. New York: McGraw-Hill, 1968.
17. MERZBACHER, E. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1970.
18. MESSIAH, A. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1968. 2 v.
19. FEHER, G.; ALLEN, J. P.; OKAMURA, M. Y.; REES, D. C. Structure and function of bacterial photosynthetic reaction centers. *Nature*, v. 339, p. 111-116, 1989.
20. SILVESTRI, L.; BASSANI, F.; CZAJKOWSKI, G.; DAVOUDI, B. Electromagnetically induced transparency in asymmetric double quantum wells. *The European Physical Journal B*, v. 27, p. 89-102, 2002.

Apêndice A

Regra de ouro de Fermi

No caso em que há um poço de potencial e uma barreira separando este poço de uma região livre de interação, a probabilidade de transição é dada pela “regra de ouro de Fermi”. Neste trabalho não é utilizado este sistema, entretanto é apresentada a seguir a dedução desta regra por questão de completeza do texto.

Se E_f pertence a região do espectro contínuo de H_0 , a densidade de probabilidade $\delta P(t)$ possibilita encontrar o sistema no estado $|\varphi_f\rangle$ num tempo t .

Assumindo que, num problema particular, certos autoestados de H_0 são rotulados por um conjunto de índices, simbolizados por α , tal que a relação de ortonormalização pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (\text{A.1})$$

Num tempo t o sistema é descrito pelo ket normalizado $|\Psi(t)\rangle$. Inicialmente, o objetivo é obter a densidade de probabilidade $\delta P(\alpha_f; t)$ de encontrar o sistema em um conjunto de estados finais; que é caracterizado pelo domínio D_f dos valores do parâmetro α , centralizado em α_f , cujas energias formam um contínuo. A densidade de probabilidade $\delta P(\alpha_f; t)$ é descrita por:

$$\delta P(\alpha_f; t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha \left| \langle \alpha | \Psi(t) \rangle \right|^2. \quad (\text{A.2})$$

Existe a possibilidade de efetuar mudança de variáveis e introduzir a densidade de estados finais, definida por $\rho(\beta, E)$. Ao invés de caracterizar estes estados pelo parâmetro α , pode ser utilizado a energia E e o parâmetro β , que são necessários quando H_0 sozinho não constitui um conjunto completo de comutação de variáveis. Então, $d\alpha$ pode ser escrita em termos de dE e $d\beta$; ou seja:

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE . \quad (\text{A.3})$$

A densidade de probabilidade passa a ser:

$$\delta P(\alpha_f; t) = \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \Psi(t) \rangle|^2 . \quad (\text{A.4})$$

Considerando um sistema que inicialmente está no autoestado $|\varphi_i\rangle$ de H_0 , em (A.4) pode-se expressar $\delta P(\alpha_i; \alpha_f; t)$ para descrever a densidade de probabilidade, e conforme a expressão (2.38) do capítulo 2, tem-se:

$$|\langle \beta, E | \Psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \beta, E | W | \alpha_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) . \quad (\text{A.5})$$

A função F é definida na expressão (2.39); E_i e E são as energias, respectivamente, dos estados $|\varphi_i\rangle$ e $|\beta, E\rangle$; então:

$$\delta P(\alpha_i; \alpha_f; t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \alpha_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) . \quad (\text{A.6})$$

Se t é suficientemente grande, esta função F pode ser aproximada para a função $\delta(E - E_i)$, uma função-delta de Dirac [1, 15]; ou seja:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t \delta(E - E_i) . \quad (\text{A.7})$$

A função $\rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \alpha_i \rangle|^2$, geralmente, varia muito lentamente com E ; e assumindo o tempo t suficientemente grande para a variação desta função sobre o intervalo de energia de largura $4\pi\hbar / t$ centralizado em $E = E_i$; então, ela pode ser desprezada. E se $\delta\beta_f$ é muito pequeno, a integração sobre β não é necessária.

Quando a energia E_i pertence ao domínio δE_f , pode-se definir:

$$\delta P(\alpha_i; \alpha_f; t) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \alpha_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) . \quad (\text{A.8})$$

Quando a energia E_i não pertence ao domínio δE_f , pode-se definir:

$$\delta P(\alpha_i; \alpha_f; t) = 0 . \quad (\text{A.9})$$

A probabilidade cresce linearmente com o tempo; logo, a probabilidade de transição por unidade de tempo é:

$$\delta W(\alpha_i, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta P(\alpha_i, \alpha_f, t) . \quad (\text{A.10})$$

A expressão $\delta W(\alpha_i, \alpha_f)$ é independente do tempo. A densidade de probabilidade de transição por unidade de tempo e por unidade do intervalo da variável β_f é:

$$X(\alpha_i, \alpha_f) = \frac{\delta W(\alpha_i, \alpha_f)}{\delta \beta_f}, \quad (\text{A.11})$$

então:

$$X(\alpha_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \beta_f, E_f = E_i | W | \alpha_i \rangle \right|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i). \quad (\text{A.12})$$

A expressão (A.12) é um importante resultado, conhecido como a “regra de ouro de Fermi”.

Apêndice B

Diagonalização de uma matriz Hermitiana 2x2

A fim de obter os resultados expressos nas equações (B.16) e (B.20) é preciso diagonalizar as matrizes que aparecem nos cálculos. Neste apêndice é apresentado em detalhe a diagonalização desejada.

Considere a matriz Hermitiana (H) na base ortonormal $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ que representa um certo operador Hermitiano H que é descrita como:

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

Esta matriz pode ser reescrita, como a soma de outras duas da seguinte forma:

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

Nota-se que o primeiro fator da soma é uma matriz diagonal.

Assim, o operador H pode ser decomposto como:

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

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

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

Considerando os autovetores $|\Psi_{\pm}\rangle$, e os autovalores correspondentes à H e K ($E_{\pm}$ e $k_{\pm}$, respectivamente), então:

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

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

logo, de (B.3) obtém-se:

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

Para determinar os autovalores e autovetores de H é necessário primeiro encontrar os autovalores de K .

Na matriz (K) da expressão (B.4) o determinante característico é:

$$\text{Det} [(K) - k I] = k^2 - 1 - \frac{4|W_{12}|^2}{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2} = 0 . \quad (\text{B.8})$$

Resolvendo a equação (B.8), obtém-se os autovalores k_+ e k_- de (K) , ou seja:

$$k_+ = \frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} , \quad (\text{B.9})$$

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

Assim sendo, com as relações acima (B.9) e (B.10), bem como a expressão (B.7), chega-se aos autovalores de H , ou seja:

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

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

Finalmente, os autovetores de H podem ser encontrados.

Sendo a e b os componentes do autovetor $|\Psi_+\rangle$ em $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, a normalização a ser obtida é dada por:

$$|\Psi_+\rangle = a|\varphi_1\rangle + b|\varphi_2\rangle . \quad (\text{B.13})$$

De acordo com (B.4), (B.6) e (B.9), tem-se:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} . \quad (\text{B.14})$$

Como a matriz é puramente não diagonal, isto é, $W_{11} = W_{22} = 0$; a relação (B.14) torna-se:

$$\left(1 - \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2} \right) a + \frac{2W_{12}}{E_1 - E_2} b = 0 \quad , \quad (\text{B.15})$$

e da condição $|a|^2 + |b|^2 = 1$, e da expressão (B.15), obtém-se o autovetor $|\Psi_+\rangle$, isto é:

$$\begin{aligned} |\Psi_+\rangle = & \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}} |\varphi_1\rangle \\ & + \sqrt{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right] \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} |\varphi_2\rangle \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Num processo análogo, sendo c e d os componentes do autovetor $|\Psi_-\rangle$ em $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, a normalização a ser obtida é dada por:

$$|\Psi_-\rangle = c |\varphi_1\rangle + d |\varphi_2\rangle \quad . \quad (\text{B.17})$$

De acordo com (B.4), (B.6) e (B.10), tem-se:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{2W_{12}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \\ \frac{2W_{21}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} =$$

$$-\frac{\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} . \quad (\text{B.18})$$

Como a matriz é puramente não diagonal, isto é, $W_{11} = W_{22} = 0$; a relação (B.18) torna-se:

$$\frac{2W_{12}}{E_1 - E_2} c + \left(-1 + \frac{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}}{E_1 - E_2} \right) d = 0 , \quad (\text{B.19})$$

e da condição $|c|^2 + |d|^2 = 1$, e da expressão (B.19), obtém-se o autovetor $|\Psi_{-}\rangle$, ou seja:

$$\begin{aligned} |\Psi_{-}\rangle = & -\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}} |\varphi_1\rangle \\ & + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} |\varphi_2\rangle , \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

As equações (B.16) e (B.20) são utilizadas no capítulo 3. Verifica-se através dos resultados obtidos nestas expressões que $|\Psi_{+}\rangle$ e $|\Psi_{-}\rangle$ são ortogonais.

A seguir, pode-se determinar os autoestados $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, por intermédio do procedimento de inversão dos autovetores $|\Psi_+\rangle$ e $|\Psi_-\rangle$.

Inicialmente, efetuando a multiplicação em (B.16), nos dois lados da igualdade, por:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.21})$$

e multiplicando em (B.20), em ambos os lados da igualdade, por:

$$- \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.22})$$

e somando-as, obtém-se:

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle = & \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{-\frac{1}{2}} \left\{ \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_+\rangle \right. \\ & \left. - \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_-\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Agora, efetuando a multiplicação em (B.16), nos dois lados da igualdade, por:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.24})$$

e multiplicando em (B.20), em ambos os lados da igualdade, por:

$$\sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.25})$$

e somando-as, obtém-se:

$$\begin{aligned} |\varphi_2\rangle = \left(\frac{W_{12}}{|W_{12}|} \right)^{\frac{1}{2}} & \left\{ \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_+\rangle \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(E_1 - E_2)}{\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}} \right]} |\Psi_-\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Apêndice C

Poço de Potencial Quadrado Infinito

Os resultados obtidos para os potenciais biestáveis podem ser tratados no limite de altas energias onde os potenciais em questão se aproximam do poço infinito. Neste apêndice é resolvido o problema da partícula confinada em uma caixa, para que o resultado possa ser usado neste teste.

O poço de potencial quadrado infinito é escrito como:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > \frac{a}{2} \\ 0 & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Este potencial está ilustrado na figura (C.1).

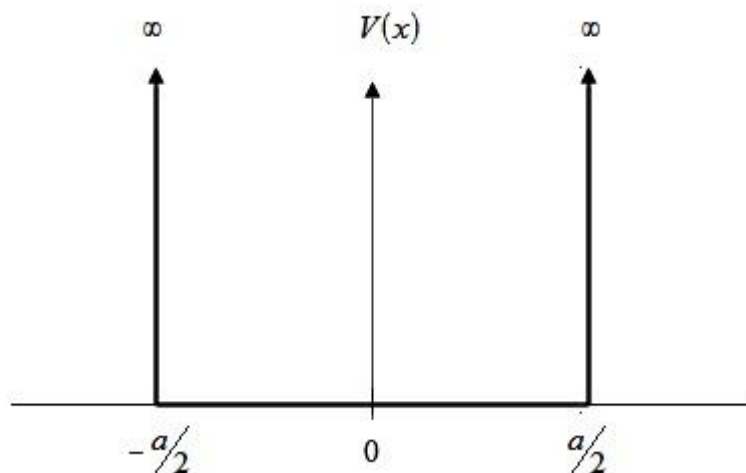


Figura C.1. Um poço de potencial quadrado infinito.

Este potencial possui a propriedade de ser capaz de confinar uma partícula que tenha qualquer energia total finita $E \geq 0$ e é bastante estudado, inclusive em livros texto [1]. Na mecânica clássica, o sistema pode assumir qualquer valor de energia, mas na mecânica quântica apenas certos autovalores discretos E_n são possíveis.

Para valores não muito altos do número quântico n os autovalores e autofunções deste potencial podem ser utilizados para aproximar os autovalores e autofunções correspondentes (mesmo n) de um poço de potencial com barreira grande, mas finita.

Na região dentro do poço, a solução geral da equação de Schrödinger independente do tempo para o poço de potencial quadrado infinito pode ser escrita como uma onda estacionária, ou seja:

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad , \quad \text{onde} \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \quad \text{e} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad . \quad (\text{C.2})$$

Nas regiões fora do poço a densidade de probabilidade é nula, pois a partícula está necessariamente confinada ao poço de potencial por suas paredes infinitamente altas. Em particular, nos limites do poço a onda estacionária tem nós nas paredes da caixa, ou seja:

$$\Psi(x) = 0 \quad \text{para} \quad x = \pm \frac{a}{2} \quad . \quad (\text{C.3})$$

As relações que são satisfeitas pelas constantes arbitrárias A e B , e pelo parâmetro k podem ser obtidas usando a condição de contorno em $x = \pm \frac{a}{2}$. Aplicando a condição de contorno em $x = \frac{a}{2}$, tem-se que:

$$A \operatorname{sen} \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad , \quad (\text{C.4})$$

e em $x = -\frac{a}{2}$, tem-se que:

$$A \operatorname{sen} \left(-\frac{ka}{2} \right) + B \cos \left(-\frac{ka}{2} \right) = 0 \quad ,$$

ou:

$$-A \operatorname{sen} \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad . \quad (\text{C.5})$$

Somando as equações (C.4) e (C.5), chega-se a seguinte expressão:

$$2B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad , \quad (\text{C.6})$$

e subtraindo-as, resulta em:

$$2A \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0 \quad . \quad (\text{C.7})$$

Tanto (C.6) quanto (C.7) devem ser satisfeitas. Quando isto é efetuado, $\Psi(x)$ e $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ serão finitas e unívocas em todos os pontos, e $\Psi(x)$ será contínua em todos os pontos. E $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ será descontínua em $x = \pm \frac{a}{2}$. Então:

$$A = 0 \quad \text{e} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad , \quad (\text{C.8})$$

ou

$$B = 0 \quad \text{e} \quad \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0 \quad . \quad (\text{C.9})$$

As condições às quais o número de onda angular k deve satisfazer, estão na forma de equações transcendentais, já que a incógnita, k , aparece nos argumentos do cosseno e do seno; portanto há dois tipos distintos de solução, descritas a seguir:

$$\Psi(x) = B \cos kx \quad , \quad \text{onde} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad , \quad (\text{C.10})$$

$$\Psi(x) = A \operatorname{sen} kx, \quad \text{onde} \quad \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0. \quad (\text{C.11})$$

Os valores possíveis de k condizente com a expressão (C.10), são:

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots,$$

devido à condição imposta pelo cosseno; tem-se:

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 3, 5, \dots. \quad (\text{C.12})$$

Os valores possíveis de k referente à expressão (C.11), são:

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots,$$

devido à condição estabelecida pelo seno; então:

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 2, 4, 6, \dots. \quad (\text{C.13})$$

Conhecendo os valores possíveis de E , obtém-se:

$$\Psi_n(x) = B_n \cos k_n x, \quad \text{onde } k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (\text{C.14})$$

e

$$\Psi_n(x) = A_n \sen k_n x, \quad \text{onde } k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 2, 4, 6, \dots. \quad (\text{C.15})$$

A solução correspondente à $n = 0$ é $\Psi_0(x) = A \sen 0 = 0$; ela é eliminada porque não descreve uma partícula em uma caixa. O número quântico n foi utilizado para indexar as diferentes soluções das equações transcendentais, as autofunções e os autovalores correspondentes. Utilizando a relação $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ de (C.2), e a expressão $k_n = \frac{n\pi}{a}$ em (C.14) e (C.15) para os valores possíveis de n , resulta:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots. \quad (\text{C.16})$$

Observa-se que apenas estes valores discretos da energia total E são acessíveis ao sistema [1, 8], ou seja, a energia total de uma partícula em uma caixa é quantizada [10, 11, 17, 18].

Apêndice D

Poço quadrado finito em um dos extremos

O poço biestável pode ser imaginado como sendo resultado da interação entre dois poços simples, com o potencial infinito de um lado e finito do outro (figura D.1). A aproximação dos dois poços pelo lado em que a barreira de potencial é finita faz com surja o potencial de duplo mínimo.

O poço de potencial quadrado finito em uma das extremidades é escrito como:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_0 & x > a \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

Este potencial está ilustrado na figura (D.1), onde se observa um degrau em um dos lados deste poço.

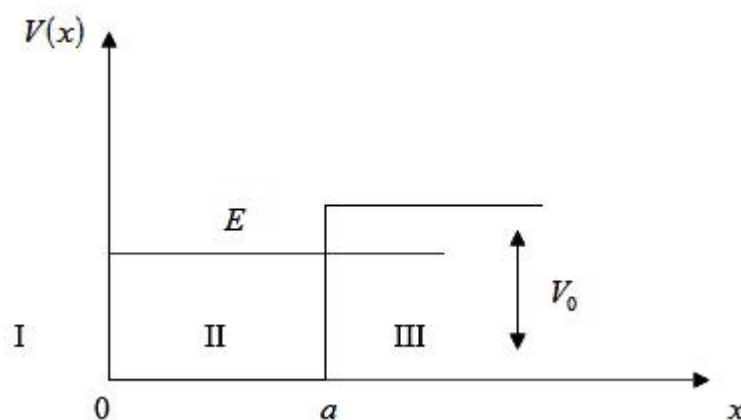


Figura D.1. Um poço de potencial quadrado finito em um dos extremos.

Nota-se que, ao aproximar dois poços da figura (D.1) é gerado um poço duplo simétrico quando suas profundidades forem idênticas, conforme tratado no quarto capítulo; e um poço duplo assimétrico quando suas profundidades forem diferentes, conforme exposto no quinto capítulo.

As equações de Schrödinger independente do tempo nas regiões II e III para o poço de potencial quadrado finito em uma das extremidades são descritas da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E \Psi \quad 0 < x < a \quad , \quad (D.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V_0 = E \Psi \quad x > a \quad . \quad (D.3)$$

Na região à esquerda do poço o potencial é nulo. Considerando $E < V_0$, a solução geral para cada região fornece:

$$\text{na região I:} \quad \Psi_0(x) = 0 \quad x < 0 \quad , \quad (D.4)$$

$$\text{na região II:} \quad \Psi_1(x) = A \operatorname{sen} kx + B \cos kx \quad 0 < x < a \quad , \quad (D.5)$$

$$\text{na região III:} \quad \Psi_2(x) = C e^{-\beta x} + D e^{\beta x} \quad x > a \quad , \quad (D.6)$$

sendo:

$$k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (\text{D.7})$$

Aplicando as condições de contorno são geradas as seguintes condições:

a) Quando x tende ao infinito, verifica-se que $\Psi_2(x)$ cresce sem limite devido à presença do segundo termo da expressão (D.6). Para evitar isto, e manter $\Psi_2(x)$ finita, admite-se que o coeficiente arbitrário D seja igual a zero.

b) A condição $\Psi_1(0) = 0$ implica que o coeficiente arbitrário B é nulo. Sendo $\Psi_1(x) = A' e^{ikx} + B' e^{-ikx}$ e com $\Psi_1(0) = 0$, conclui-se que: $A' + B' = 0$, logo: $A' = -B'$.

Substituindo esta última igualdade em $\Psi_1(x)$ tem-se: $\Psi_1(x) = A' (e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA' \sin kx$.

Portanto: $\Psi_1(x) = A \sin kx$.

A continuidade da função de onda e da sua primeira derivada implica que:

$$\Psi_1(a) = \Psi_2(a) \quad \text{e} \quad \left. \frac{d\Psi_1}{dx} \right|_a = \left. \frac{d\Psi_2}{dx} \right|_a , \quad (\text{D.8})$$

ou seja:

$$A \operatorname{sen} ka = C e^{-\beta a} ,$$

(D.9)

$$Ak \cos ka = -\beta C e^{-\beta a} .$$

A solução das expressões em (D.9) é dada por:

$$\operatorname{sen} ka = -\frac{k}{\beta} \cos ka \Rightarrow \cot ka = -\frac{\beta}{k} . \quad (\text{D.10})$$

A equação (D.10) produz os autovalores da energia E_n . Esta equação, também, pode ser escrita do seguinte modo:

$$|\operatorname{sen} ka| = \frac{k}{k_0} , \quad (\text{D.11})$$

pois:

$$\frac{1}{\operatorname{sen}^2(ka)} = 1 + \cot^2(ka) = \frac{k^2 + \beta^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} , \quad (\text{D.12})$$

onde:

$$k_0 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (\text{D.13})$$

Através da expressão (D.11) pode ser construído um gráfico evidenciando as regiões indicadas pelas setas onde $\cot ka < 0$, visto na figura (D.2).

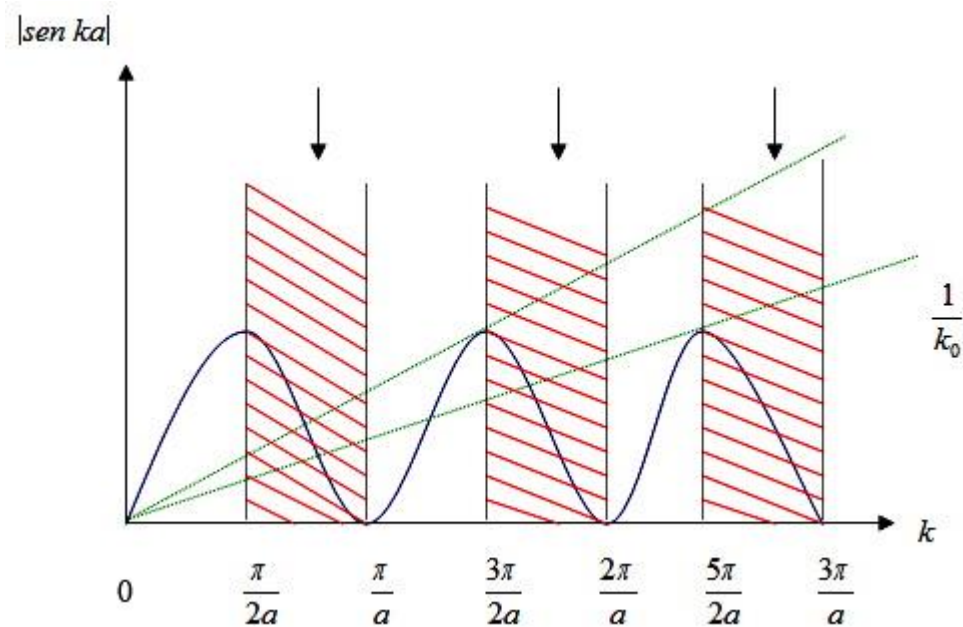


Figura D.2. Gráfico de $|sen ka|$ em função de k , e regiões onde a $\cot ka < 0$.

As raízes produzidas pelas intersecções da curva do módulo do seno com a reta $1/k_0$ nas áreas consideradas determinam os autovalores da energia correspondentes.

A figura (D.3) é um exemplo da utilização da equação (D.10) aplicada a uma barreira de potencial de 1×10^3 eV e a é igual a 1×10^{-10} m. Observa-se que as intersecções são estabelecidas em regiões onde a cotangente é negativa.

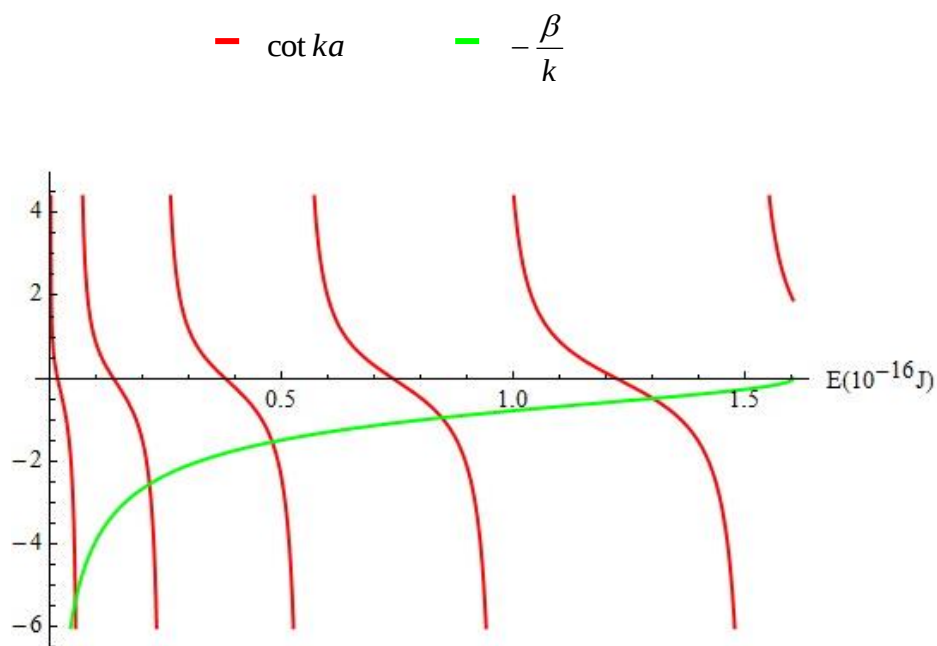


Figura D.3. Autovalores da energia para uma barreira de potencial de 1×10^3 eV.

Na figura (D.3) a curva verde é a razão $-\frac{\beta}{k}$ e a curva vermelha é a $\cot ka$, ambas constituintes da expressão (D.10). Praticamente, as soluções encontradas nas figuras (D.2) e (D.3) são, efetivamente, as mesmas.

Apêndice E

Resultados Numéricos e Gráficos para o Poço Simétrico e Assimétrico

Neste apêndice são mostrados os resultados numéricos obtidos graficamente, tanto para o poço duplo simétrico como para o assimétrico. A seguir, são mostrados os autovalores da energia para alguns valores da profundidade da barreira do poço duplo simétrico com $E < V_0$, que nas figuras (E.1), (E.2) e (E.3) correspondem às intersecções das curvas em verde e azul com a vermelha; caracterizadas pelas equações transcendentais (4.20.a) e (4.20.b) do capítulo 4. A curva na cor vermelha revela o lado esquerdo destas equações, e a curva na cor verde é caracterizada pelo lado direito da expressão (4.20.a), enquanto que a curva na cor azul é representada pelo lado direito da expressão (4.20.b).

Nos cálculos para obtenção dos autovalores da energia, os valores utilizados da largura dos poços e da distância entre eles são, respectivamente: $a = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$ e $L = 2 \times 10^{-10} \text{ m}$.

Inicialmente, para uma barreira de potencial igual a $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$, observa-se um único nível de energia no poço simples, enquanto que no poço duplo simétrico existem dois níveis de energia, conforme figura (E.1), cujos autovalores são: $E_1 = 3,419 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $E_2 = 3,706 \times 10^{-18} \text{ J}$. O tempo de tunelamento é $1,555 \times 10^{-15} \text{ s}$.

Observa-se que a duplicação dos níveis de energia ocorre somente no poço duplo, devido à aproximação de dois poços simples; e, apenas, neste momento a probabilidade de ocorrer tunelamento torna-se favorável.

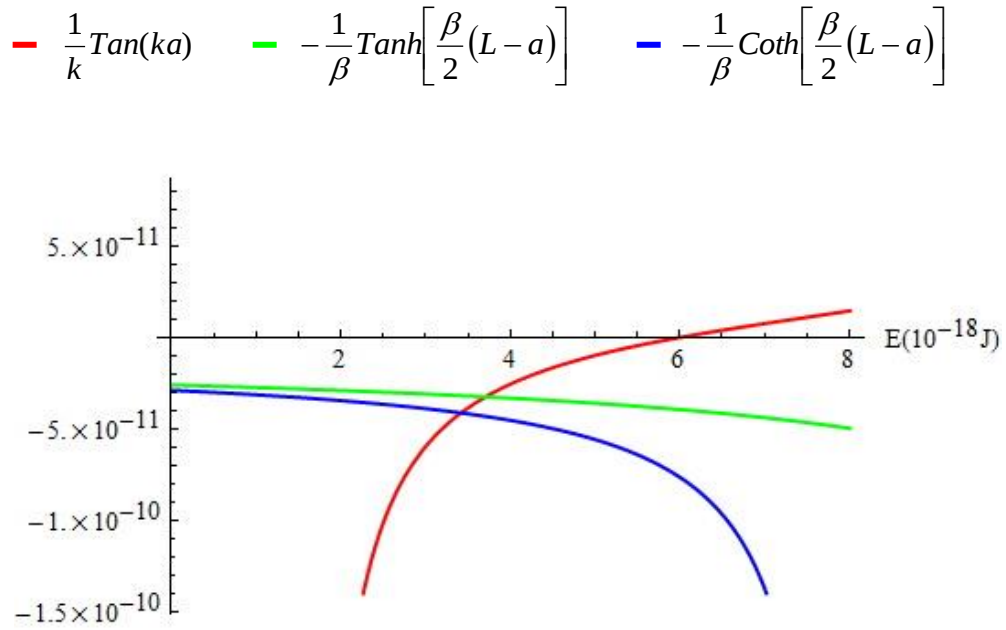


Figura E.1. Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 8,010 \times 10^{-18}$ J.

Para uma barreira de potencial igual a $V_0 = 1,602 \times 10^{-17}$ J, nota-se dois níveis de energia no poço isolado e quatro níveis no poço duplo simétrico, conforme figura (E.2), cujos autovalores são: $E_1 = 4,126 \times 10^{-18}$ J, $E_2 = 4,181 \times 10^{-18}$ J, $E_3 = 1,467 \times 10^{-17}$ J e $E_4 = 1,581 \times 10^{-17}$ J. O tempo de tunelamento entre os estados E_1 e E_2 é $6,014 \times 10^{-15}$ s.

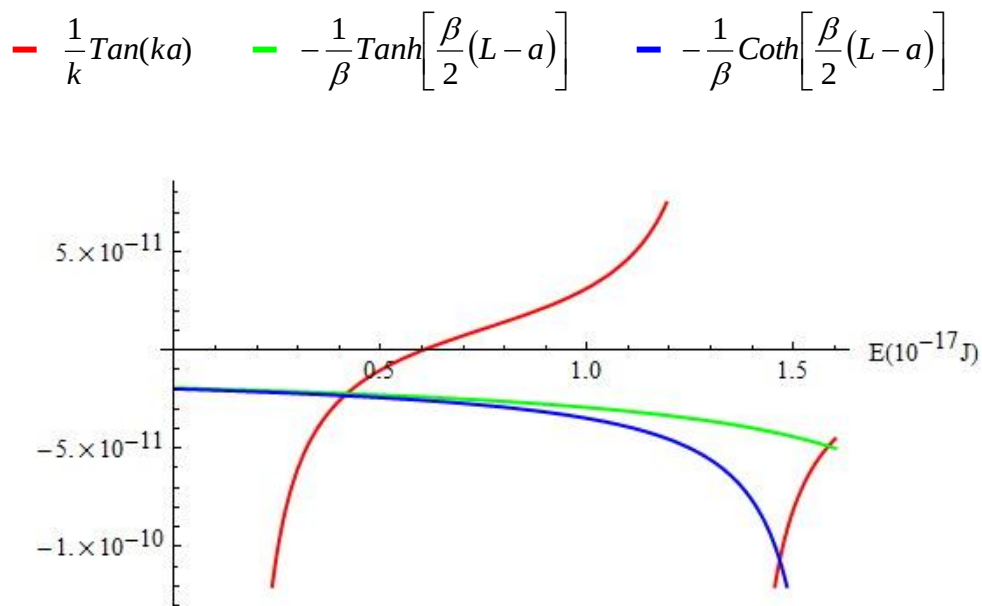


Figura E.2. Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 1,602 \times 10^{-17}$ J.

Agora, para uma barreira de potencial igual a $V_0 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$, nota-se três níveis de energia no poço isolado e seis níveis no poço duplo simétrico, conforme figura (E.3), cujos autovalores são: $E_1 = 4,852 \times 10^{-18} \text{ J}$, $E_2 = 4,853 \times 10^{-18} \text{ J}$, $E_3 = 1,915 \times 10^{-17} \text{ J}$, $E_4 = 1,917 \times 10^{-17} \text{ J}$, $E_5 = 4,124 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $E_6 = 4,164 \times 10^{-17} \text{ J}$. O tempo de tunelamento entre os estados E_1 e E_2 é $1,655 \times 10^{-14} \text{ s}$.

Através destes resultados verifica-se que o tempo de tunelamento decresce quando a barreira de potencial ou a profundidade dos poços aumenta, mantendo a largura dos poços e a distância entre eles inalteradas.

$$\text{---} \frac{1}{k} \tan(ka) \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right] \quad \text{---} -\frac{1}{\beta} \coth\left[\frac{\beta}{2}(L-a)\right]$$

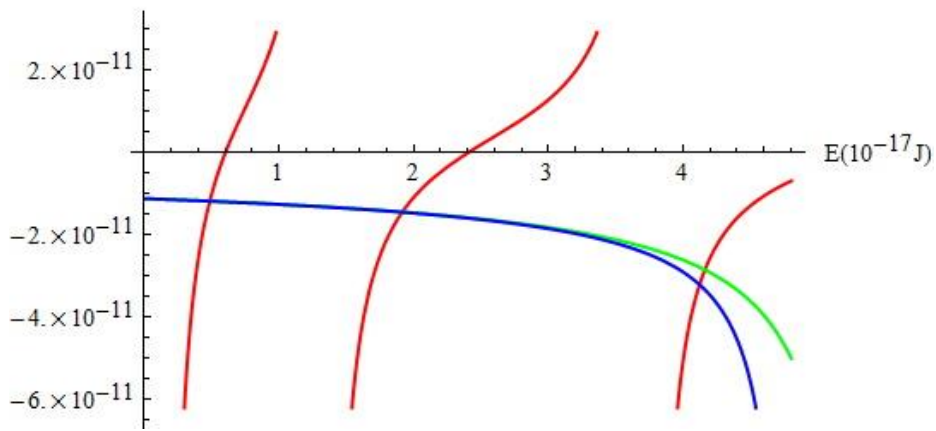


Figura E.3. Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$.

Realizou-se um teste de consistência aplicando a equação transcendental (4.19) do capítulo 4, para obter os mesmos autovalores da energia E_1 e E_2 encontrados na figura (E.1) acima. O resultado é mostrado na figura (E.4).

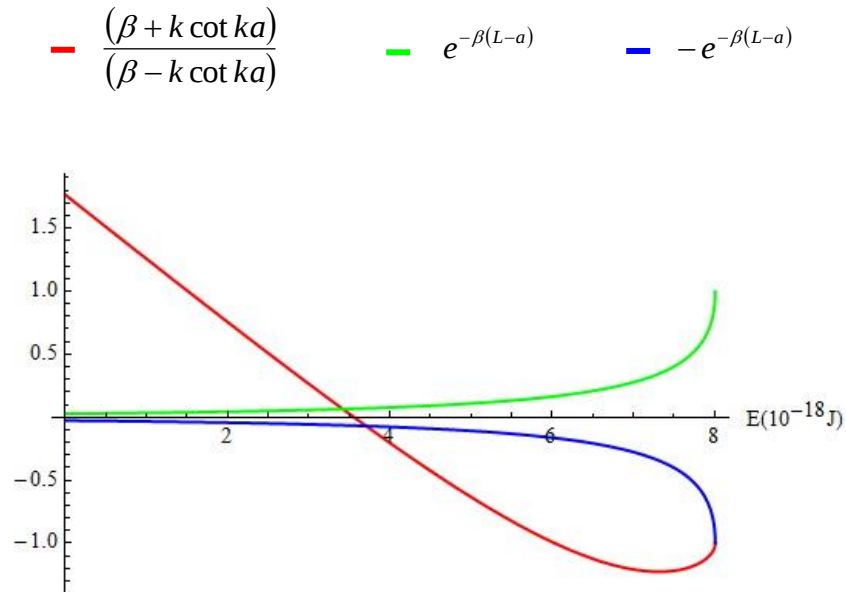


Figura E.4. Autovalores de energia para o potencial $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$.

Na figura (E.4) a curva em vermelho representa o lado esquerdo da equação transcendental (4.19), e as curvas verde e azul representam o lado direito da mesma equação.

Na sequência são mostrados os autovalores da energia para alguns valores da profundidade da barreira do poço duplo assimétrico para $E < V_1$, no caso ressonante, apresentado nas figuras (E.5) e (E.6), e no caso não ressonante, apresentado nas figuras (E.7) e (E.8). Os autovalores da energia são encontrados pelas intersecções das curvas em verde com a vermelha, caracterizada pela equação transcendental (5.19) localizada no capítulo 5. A curva vermelha representa o lado esquerdo da equação (5.19) e a curva verde representa o lado direito desta equação.

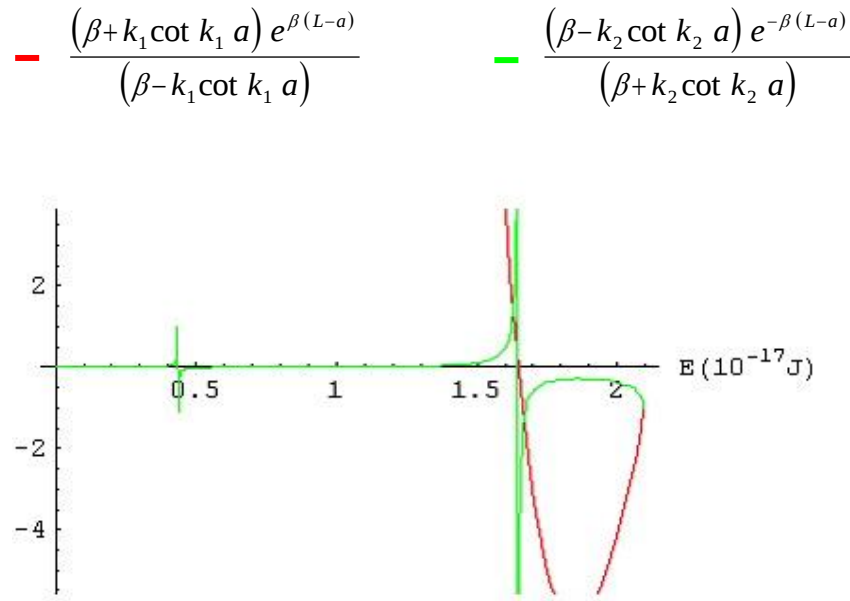


Figura E.5. Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 2,0925 \times 10^{-17} \text{ J}$.

Para o caso ressonante, com as profundidades de cada poço sendo dadas pelos potenciais $V_1 = 2,0925 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$, os autovalores da energia são: $E_1 = 4,349 \times 10^{-18} \text{ J}$, $E_2 = 1,629 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $E_3 = 1,668 \times 10^{-17} \text{ J}$, representados na figura (E.5). Observa-se que o primeiro estado se situa no poço de maior profundidade e não possui correspondente no poço de menor profundidade. O tempo de tunelamento entre os estados E_2 e E_3 é $8,497 \times 10^{-16} \text{ s}$.

O primeiro pico na curva em verde na figura (E.5) em torno de $4,5 \times 10^{-18} \text{ J}$ apresenta uma intersecção com a curva em vermelho, que não está aparecendo devido à resolução gráfica da figura. O autovalor da energia correspondente é evidenciado na figura (E.6) que destaca esta região.

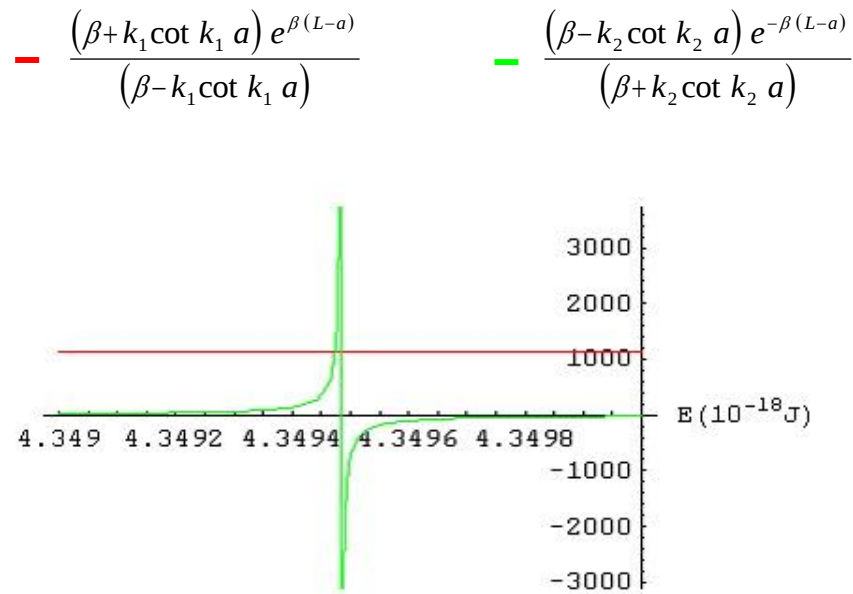


Figura E.6. Autovalor da energia $E_1 = 4,349 \times 10^{-18} \text{ J}$ para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 2,0925 \times 10^{-17} \text{ J}$.

Para o caso não ressonante, com as profundidades de cada poço sendo dadas pelos potenciais $V_1 = 1,602 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$. Verificam-se três níveis de energia para o poço duplo assimétrico, conforme figura (E.7), cujos autovalores são: $E_1 = 4,153 \times 10^{-18} \text{ J}$, $E_2 = 1,156 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $E_3 = 1,516 \times 10^{-17} \text{ J}$.

E ainda para o caso não ressonante, com as profundidades de cada poço sendo dadas pelos potenciais $V_1 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$. São observados quatro níveis de energia para o poço duplo assimétrico, conforme figura (E.8), cujos autovalores são: $E_1 = 4,852 \times 10^{-18} \text{ J}$, $E_2 = 1,916 \times 10^{-17} \text{ J}$, $E_3 = 4,142 \times 10^{-17} \text{ J}$ e $E_4 = 4,363 \times 10^{-17} \text{ J}$.

Nota-se no caso não ressonante a ocorrência de um fraco acoplamento e pequena probabilidade de tunelamento, justamente devido à ausência de ressonância, pois não se verifica correspondência dos níveis de energia entre os poços.

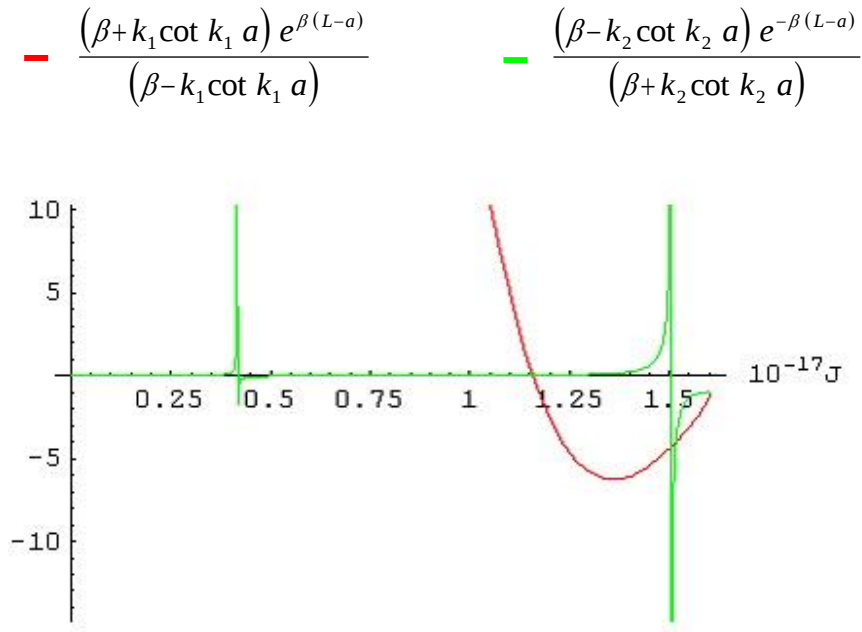


Figura E.7. Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 1,602 \times 10^{-17} \text{ J}$.

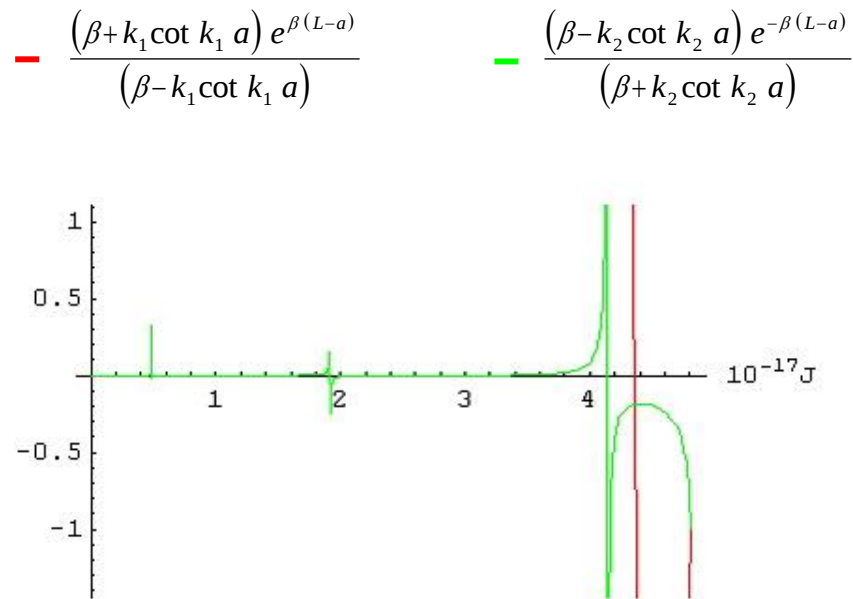


Figura E.8. Autovalores de energia para os potenciais $V_0 = 8,010 \times 10^{-18} \text{ J}$ e $V_1 = 4,806 \times 10^{-17} \text{ J}$.

Nas figuras (E.7) e (E.8) o primeiro pico na curva em verde apresenta uma intersecção com a curva em vermelho, que não está aparecendo devido à resolução gráfica da figura; esta região está situada no lado do poço mais profundo caracterizando o estado de energia mais

baixo, que nesta situação, devido à assimetria, não possui correspondente no poço de menor profundidade.

E ainda na figura (E.8) aparece um segundo pico na curva em verde que ao interceptar com a curva em vermelho gera o segundo nível de energia no poço duplo considerado.