UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Cleverson Francisco Cherubim

Processos de tunelamento em sistemas unidimensionais

São Carlos 2015

Cleverson Francisco Cherubim

Processos de tunelamento em sistemas unidimensionais

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Frederico Borges de

Brito

Versão Corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2015

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

```
Cherubim, C. F.
Processos de tunelamento em sistemas
unidimensionais / C. F. Cherubim; orientador
Frederico Borges de Brito - versão corrigida -- São
Carlos, 2015.
74 p.
```

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2015.

1. Cotunelamento. 2. Tunelamento de altas ordens. 3. Tunelamento macroscópico de carga. 4. Transporte quântico. I. Borges de Brito, Frederico, orient. II. Título.

AOS QUE LEREM ESTE TRABALHO.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a minha família, principalmente a minha mãe Laudelina e meus dois irmãos Emerson e Wilian por todo o apoio em meu percurso universitário e principalmente por todo o tempo que passei ao lado deles.

A grande família do Velho: Camarão, Mercenário, Homero, Tarlei, Camila, Nobuo, Isa, Mad, Fabiano, Baleia, Puxadinho e muitos outros, que durante todos esses meus seis anos de São Carlos tem me propiciado muita alegria, experiência de vida e amizade.

Ao Penalva, grande amigo e companheiro de escalada, pelas discussões em física e principalmente pela amizade.

A galera da minha turma de graduação, Benzão, Kavera, Minduin, Manga, Velma, Tutu, Epson, Mateus, Milena, Iberê, Diogo, Burca e vários outros.

Ao meu amigo Chicão por todas as discussões (e brigas) que tivemos em física e principalmente por sua amizade e conselhos depois daquela cerveja gelada.

A galera da escalada de São Carlos e o grupo CUME pelas monitorias, escaladas de final de semana e altas trips que tem me propiciado muita alegria, saúde e estilo de vida.

Aos mosntros Victor, Rafael, Eliceo (no cara se é...), Pedrão, Hugo e Flávio pelas discussões em física e por todo a alegria e descontração que essa galera leva pro trabalho.

Ao Prof. Miled e ao Gentil pelas discussões e ajuda neste trabalho.

Agradeço principalmente a meu orientador Frederico Brito, primeiramente pelo voto de confiança ao aceitar ser meu orientador, pela paciência e disposição em me ouvir e sanar minhas dúvidas, pela dedicação ao trabalho e principalmente pela ajuda intelectual, crucial para a realização deste trabalho.

Este trabalho foi financiado pelo CNPq

"Tigre, tigre, que flamejas Nas florestas da noite, Que mão, que olho imortal Se atreveu a plasmar tua terrível simetria?"

> Autor: William Blake Tradução: Ângelo Monteiro

Resumo

CHERUBIM, C.F. *Processos de tunelamento em sistemas unidimensionais*. 2015. 74 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

Neste trabalho apresentamos uma análise de possíveis processos de tunelamento em sistemas unidimensionais através do estudo do potencial de barreira dupla com região intermediária confinante, conseguimos verificar a existência de um processo de tunelamento que ocorre através da ocupação virtual da região intermediária. Uma modelagem deste fenômeno é proposta baseando-se em uma teoria perturbativa realizada em termos de estados "quase-localizados" da partícula. Além da descrição qualitativa do fenômeno, determinamos as condições físicas para que este processo de tunelamento, também chamado de cotunelamento ou tunelamento de ordem superior, ocorra. Como resultado, recuperamos com boa aproximação o coeficiente de transmissão exato do sistema escolhido. Por fim, um outro resultado obtido durante o desenvolvimento deste trabalho foi uma prova conclusiva da convergência do método de diferenças finitas FDTD aplicada à equação de Schrödinger. Esta prova, diferente das demais encontradas na literatura, conseguiu demonstrar de maneira conclusiva a inclusão do limite superior para o passo temporal, de maneira a assegurar a convergência das soluções numéricas, algo até então testado numericamente, mas sem uma prova rigorosa da sua validade.

Palavras-chave: Cotunelamento. Tunelamento de altas ordens. Tunelamento macroscópico de carga. Transporte quântico.

Abstract

CHERUBIM, C. F. *Tunnelling processes in one-dimensional systems*. 2015. 74 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

In this work, we present a study about tunnelling processes occurring in one-dimensional systems. Choosing a double well potential with a confining region as a case study, we verified that there is a tunnelling process which is due to virtual occupation of the confining region. Using perturbative theory of quasi-localized states to describe the particle's dynamics, we provide a qualitative description of the phenomenon of tunnelling through virtual occupation, and we are capable of determining the conditions for which such a tunnelling (also known as cotunnelling or high-order tunneling) should be present. With this analysis we could calculate with good approximation the particle transmission coefficient through the barrier. Finally, we also provide a rigorous proof of the convergence conditions for the numerical calculation of the Schrödinger equation using the finite difference method.

Keywords: Cotunnelling. High-order tunnelling. Macroscopic charge tunnelling. Quantum transport.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 -	Potencial utilizado para descrever a emissão de partículas α em núcleos de U ²³⁸ . O raio $r_2=3x10^{-14}$ foi obtido por Rutherford em seus experimentos de espalhamento, o raio r_1 indica a menor distância para a qual a lei de Coulomb se mostrava válida (raio nuclear). O potencial sugerido por Gamow considerava que a lei de Coulomb era válida até r_1 e então rapidamente diminuía de maneira a formar uma região confinante $r < r_1$. O ponto r_3 indica a posição de escape de uma partícula α de $4.2 MeV$ emitida por este núcleo .	25
Figura 1.2 -	Decomposição do potencial de Gamow em um conjunto de barreiras simples adjacentes	26
Figura 1.3 -	Sistema contendo dois eletrodos (fonte e dreno) e uma região metálica intermediária (ilha) separados por regiões isolantes	27
Figura 2.1 -	Teste de convergência do método utilizado na resolução da equação de Schrödinger para potencial constante e igual a zero em dois passos temporais diferentes. O primeiro gráfico (esquerda) mostra a evolução da ocupação em todo o espaço da função de onda quando $\Delta t' = \Delta t'_{crítico}$ como função da quantidade de passos temporais, e vemos que o método converge. Observamos também que a convergência é mais precisa para um valor de $\Delta x'$ menor, como previsto anteriormente. Medimos a mesma coisa no gráfico seguinte mas agora com $\Delta t' = 1.001\Delta t'_{crítico}$ e vemos que neste caso a solução começa a divergir por volta de 380 passos temporais.	37

Figura 2.2 -	Teste de convergência do método utilizado na resolução da equação de Schrödinger para potencial harmônico em dois passos temporais diferentes. O primeiro gráfico (esquerda) mostra a evolução da ocupação em todo o espaço da função de onda quando $\Delta t^{'} = \Delta t^{'}_{crítico}$ como função da quantidade de passos temporais, e vemos que o método converge. Medimos a mesma coisa no gráfico seguinte mas agora com $\Delta t^{'} = 1.001\Delta t^{'}_{crítico}$ e vemos que neste caso a solução começa a divergir por volta de 1300 passos temporais	38
Figura 3.1 -	Gráfico contendo as regiões ocupáveis, regiões brancas, e regiões isolantes não ocupáveis, faixas pretas, que fazem o papel das barreiras de potenciais. As setas interligando regiões brancas adjacentes (separadas por uma faixa preta) representam o tunelamento, enquanto que as setas interligando regiões não adjacentes representam o cotunelamento ou tunelamento de ordem superior	40
Figura 3.2 -	Barreira simples	41
Figura 3.3 -	Típico comportamento do coeficiente de transmissão da partícula através da barreira simples de altura V_0 e largura L (conforme figura 3.2) como função da energia da partícula incidente. Note que mesmo para energias abaixo de V_0 ainda existe transmissão, caracterizando o tunelamento (a rigor a transmissão só vai a zero para energia nula, ou seja, não existe partícula)	43
Figura 3.4 -	Barreira dupla com região intermediária não nula	44
Figura 3.5 -	Linhas interrompidas: Coeficiente de transmissão $(T(E) = \frac{ M ^2}{ A ^2})$ com relação a energia da partícula incidente para duas barreiras simples, uma com altura V_0 e outra com altura V_1 (ambas com comprimento $2(d+t)$). Linha sólida: Coeficiente de transmissão para um sistema de barreiras duplo com região intermediária de altura V_0 e largura $2d$ e barreiras externas de altura V_1 e largura t conforme indicado na figura t 3.4	45
Figura 3.6 -	Variação do potencial parabólico duplo com o parâmetro de assimetria U	47
Figura 3.7 -	Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para o sistema simétrico ($U=0$). Tempo de tunelamento $\tau=37,5.\dots$	48
Figura 3.8 -	Níveis de energia das parábolas isoladas do restante do sistema em três configurações distintas simuladas em nosso trabalho. (a) Primeira condição de ressonância (U=0), (b) Fora de ressonância (U=1) e (c) segunda condição de ressonância (U=2)	49
Figura 3.9 -	Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para uma assimetria de $U=2$. Tempo de tunelamento $\tau=28,2.$	49

Figura 3.10 -	Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para uma assimetria de $U=1$. Transmissão máxima de 3, 1%	50
Figura 3.11 -	Gráfico contendo a máxima ocupação da parábola a direita (máxima probabilidade de transmissão) como função da assimetria do sistema de parábolas	51
Figura 3.12 -	Gráfico contendo as funções de onda no instante inicial $t=0$ e depois de evoluídas temporalmente até atingir o tempo de tunelamento $t=38$ (Tempo necessário para que haja a primeira máxima ocupação da parábola a direita) para sistema de parábolas simétrico.	52
Figura 3.13 -	Gráfico contendo as funções de onda no instante inicial $t=0$ e depois de evoluídas temporalmente até atingir o tempo de tunelamento $t=28$ (Tempo necessário para que haja a primeira máxima ocupação da parábola a direita) para sistema de parábolas com assimetria $U=2. \ldots \ldots \ldots \ldots$	52
Figura 3.14 -	Evolução temporal da função de onda para sistema de parábolas simétrico	53
Figura 3.15 -	Evolução temporal da função de onda para sistema de parábolas com assimetria $U=2.\ldots\ldots$	53
Figura 3.16 -	Ocupação das regiões esquerda e direita como função do tempo para o potencial de barreira duplo sem região intermediária e barreiras confinantes nas bordas. Tempo de tunelamento $\tau \approx 49.05$. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0,\ t=0.5,\ d=0.5,\ V_0=2.0$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial	55
Figura 3.17 -	Evolução temporal da função de onda no sistema de poço duplo quadrado visando observar a transmissão coerente. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0,\ t=0.5,\ d=0.5,\ V_0=2.0\ {\rm e}\ V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial	56
Figura 3.18 -	Ocupação das regiões esquerda e direita como função do tempo para o potencial de barreira duplo com região intermediária diferente de zero e barreiras confinantes nas bordas. Tempo de tunelamento $\tau \approx 45.24$. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0$, $t=0.5$, $d=0.5$, $V_0=1.7$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial	58

Figura 3.19 -	Evolução temporal da função de onda no sistema de barreira duplo com região intermediária e barreiras confinantes nas bordas visando observar a transmissão coerente. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0$, $t=0.5$, $d=0.5$, $V_0=1.7$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial	59
Figura 3.20 -	Potenciais (i) e (ii) respectivamente	60
Figura 3.21 -	Autofunções para os potenciais indicados em (i) e (ii). As autofunções $\psi_L(x)$ e $\psi_R(x)$ ($\psi_L(x) = \langle x L(E)\rangle$ e $\psi_R(x) = \langle x R(E)\rangle$) representam os autoestados do potencial indicado em (i), enquanto que as autofunções $\psi_{l_i}(x)$ ($i=1,2,3,4$) representam as quatro primeiras e únicas autofunções ligadas, localizadas entre V_0 e V_1 , do potencial indicado em (ii). Utilizamos $V_0=0.3,\ V_1=1.0,\ d=5.0$ e $t=2.0$ como parâmetros nos potenciais em questão. Essas autoenergias do potencial (ii) representam as energias de ressonância do potencial original. (sistema de barreira duplo com região intermediária)	61
Figura 3.22 -	Overlap entre as autofunções dos potenciais apresentados em (i) e (ii) como função da energia da autofunção à esquerda (ou direita). Parâmetros utilizados nos potenciais: $V_0 = 0.3$, $V_1 = 1.0$, $d = 5.0$ e $t = 2.0$	62
Figura 3.23 -	Elementos de matriz do Hamiltoniano do potencial original (potencial duplo comregião intermediária) na base de autofunções dos potenciais apresentados em (i) e (ii) $(\{ L\rangle, \{ I\rangle, \{ R\rangle\})$ como função da energia da autofunção à esquerda (ou direita). Parâmetros utilizados nos potenciais: $V_0=0.3,\ V_1=1.0,\ d=5.0$ e $t=2.0$	64
Figura 3.24 -	Comparação do coeficiente de transmissão aproximado com o exato no sistema de barreira dupla com região intermediária. Parâmetros do potencial: $V_0 = 0.3$, $V_1 = 1.0$, $d = 5.0$ e $t = 2.0$	66

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Mecânica quântica e tunelamento	23
1.1.1	Decaimento radioativo	24
1.2	Single charge tunneling	27
2	MÉTODO NUMÉRICO E PROVA DE CONVERGÊNCIA	29
2.1	Método de diferenças finitas no domínio temporal (FDTD)	29
2.1.1	Discretização da equação de Schrödinger	30
2.2	Prova da convergência do método	32
2.3	Teste de convergência	37
3	PROCESSOS DE TUNELAMENTO EM POTENCIAIS COM REGIÕES	
	INTERMEDIÁRIAS CONFINANTES	39
3.1	Diferenças entre tunelamento e cotunelamento	39
3.2	Tunelamento de 1 ^a ordem	41
3.3	Barreira dupla e o cotunelamento	43
3.4	Oscilador harmônico duplo assimétrico	46
3.5	Recuperando resultados	47
3.5.1	Transmissão coerente e incoerente no oscilador duplo	51
3.5.2	Transmissão coerente no poço duplo	54
3.6	Resultados principais	56
3.6.1	Cotunelamento e transmissão coerente no poço duplo com região intermediária	56

3.6.2	Processos de ocupação virtual e teoria de perturbação	59
3.6.3	Cálculo do coeficiente de transmissão	65
4	CONCLUSÃO	67
REFE	REFERÊNCIAS	
APÊN	APÊNDICE	
Α	Núcleo do programa utilizado para simular a equação de Schrödinger	7 3

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Este trabalho de mestrado tem por objetivo principal obter a prova do cotunelamento para sistemas não confinados através do cálculo dos coeficientes de segunda ordem em teoria de perturbação que acoplam de maneira indireta, através de estados intermediários, duas regiões separadas espacialmente e comparar estes coeficientes com a transmissão obtida através de simulações computacionais da equação de Schrödinger para estes mesmos sistemas. Como segunda proposta apresentaremos uma prova matemática para a convergência do método de diferenças finitas FDTD aplicado a equação de Schrödinger que inclui o limite superior do passo temporal ($\Delta t'_{crítico}$) como convergente. Testaremos essas condições de convergência através das simulações utilizadas ao longo deste trabalho.

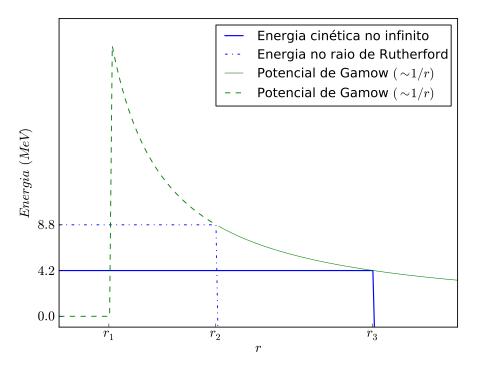
1.1 Mecânica quântica e tunelamento

O começo do século XX presenciou uma das maiores e mais estranhas revoluções na física, o surgimento da mecânica quântica, teoria criada na tentativa de suprir as dificuldades encontradas pelas teorias clássicas na descrição de sistemas físicos, especialmente aqueles envolvendo pequenas escalas. Dentre os assuntos cobertos pela teoria, uma em específico e de extrema importância para este projeto é o tunelamento, fenômeno que ocorre quando uma dada partícula transpassa uma barreira de potencial mesmo sem energia para tal. O tunelamento começou a ser estudado experimentalmente no contexto de radioatividade (1), em específico no decaimento de partículas α . (2)

1.1.1 Decaimento radioativo

O comportamento Coulombiano do potencial apresentado na interação de partículas carregadas começou a ser estudado no começo do século XX, principalmente, ou pelo menos de maneira mais conhecida, por Rutherford através de experimentos de espalhamento de partículas α em núcleos de U²³⁸. Ele utilizava partículas α com energia cinética de 8.8 MeV emitidas por núcleos de Po^{212} , e fazia medidas da intensidade de espalhamento como função do ânqulo, comparando com a expressão obtida por ele mesmo utilizando como interação fundamental a lei de Coulomb $V(r)=\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, sendo 2e e Ze as cargas da partícula lpha e do U^{238} respectivamente. O comportamento Coulombiano, segundo os experimentos de Rutherford, valeriam até uma distância de $r_2 = 3x10^{-14}m$, distância em que toda a energia cinética da partícula α se tornaria potencial (ponto de retorno), $V(r_2)=8$, 8MeV. Na verdade, experimentos com átomos mais leves revelavam que o potencial visto pela partícula α só deixava de seguir a lei de Coulomb 1/r para distâncias da ordem ou menores do que o raio nuclear r_1 . Por outro lado, como partículas α eventualmente são emitidas por núcleos de U²³⁸, era natural imaginar que o potencial para distâncias menores do que a do raio nuclear deveria ser confinante, de maneira a manter tais partículas ligadas ao núcleo. Este tipo de raciocínio fez com que Gamow e colaboradores sugerissem em 1928 (2) que o potencial V(r) tivesse a forma qualitativa da figura 1.1 (que foi confirmada por experimentos modernos de espalhamento α em cíclotrons (3))

Figura 1.1 – Potencial utilizado para descrever a emissão de partículas α em núcleos de U²³⁸. O raio $r_2 = 3x10^{-14}$ foi obtido por Rutherford em seus experimentos de espalhamento, o raio r_1 indica a menor distância para a qual a lei de Coulomb se mostrava válida (raio nuclear). O potencial sugerido por Gamow considerava que a lei de Coulomb era válida até r_1 e então rapidamente diminuía de maneira a formar uma região confinante $r < r_1$. O ponto r_3 indica a posição de escape de uma partícula α de 4.2 MeV emitida por este núcleo



Fonte: Elaborada pelo autor

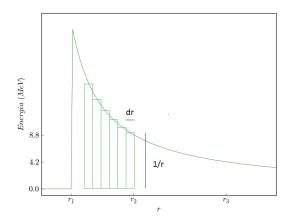
Levando este potencial resultante em consideração, experimentos de emissão de partículas α por núcleos de U²³⁸ levavam a um paradoxo segundo as teorias clássicas. Ao medir a energia cinética destas partículas em distâncias muito maiores do que o raio nuclear, tal que $V(r) \rightarrow 0$, chegava-se a conclusão de que a energia total das partículas emitidas era de 4.2 MeV, duas vezes menor que a altura do potencial no raio de Rutherford. Assim, para que esta partícula fosse medida fora do núcleo de U²³⁸ ela teria que ter ultrapassado uma barreira de potencial com o dobro de sua energia. Para explicar este fenômeno Gamow (2) e colaboradores se utilizaram da teoria quântica para descrever o fenômeno, pois a partícula poderia transpassar a barreira de potencial mesmo sem energia para tal através do tunelamento quântico. Usando-se este modelo de potencial eles calcularam o coeficiente de transmissão para as partículas α confinadas no núcleo. Eles partiram do coeficiente de transmissão de uma barreira simples com altura V_0 e largura α dado pela

seguinte expressão (3),

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0}) e^{-2ka},$$
 (1.1)

com $ka = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}(1-\frac{E}{V^0})}$. Neste caso o fator exponencial domina o comportamento do coeficiente de transmissão devido ao fato de seu expoente ser muito grande. Assim podemos manter, com boa aproximação, somente a exponencial, $T \approx e^{-2ka}$. O potencial resultante no qual as partículas α estavam sujeitas foi decomposto em um sistema com várias barreiras adjacentes de altura variável $V(r_i)$ e largura Δr .

Figura 1.2 – Decomposição do potencial de Gamow em um conjunto de barreiras simples adjacentes.



Fonte: Elaborada pelo autor

Assim no limite de $\Delta r \rightarrow 0$ eles obtiveram o seguinte coeficiente de transmissão,

$$e^{-2\int_{r_1}^{r_3} \sqrt{(2m/\hbar^2)(V(r)-E)}dr}. (1.2)$$

Note que a integral vai do raio nuclear r_1 , ponto em que a partícula α encontra a barreira, até r_3 , distância em que a partícula escapa da barreira (ver figura 1.1). Esse coeficiente nos fornece a probabilidade aproximada da partícula ultrapassar a barreira em um choque. Partindo deste resultado, eles estimaram a taxa de decaimento das partículas α como função de sua energia como sendo

$$R \approx \frac{V}{2r_1} e^{-2\int_{r_2}^{r_3} \sqrt{(2m/\hbar^2)(V(r)-E)} dr},$$
(1.3)

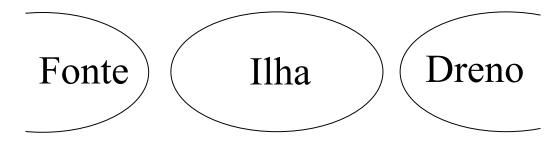
sendo v a velocidade da partícula no interior da região confinante e $2r_1$ o diâmetro nuclear (a distância que a partícula teria em tese que percorrer entre um choque e outro – note que

o número de choques por segundo é dado por $v/2r_1$). Gamow, Condon e Gurney tomaram todas as quantidades que apareciam na expressão de R como conhecidas, com exceção de v e de r_1 (r_3 eles estimaram através de Z e E). Assumindo que a velocidade da partícula α quando confinada é da ordem de sua energia depois da emissão, eles obtiveram o valor de v, assim R passa a depender somente do raio nuclear r_1 . Usando $r_1 = 9x10^{-15}m$, eles obtiveram para o núcleo de urânio U^{238} uma transmissão $R = 5x10^{-18}s^{-1}$, em bom acordo com as medidas experimentais.

1.2 Single charge tunneling

Outro exemplo no qual o tunelamento desempenha papel importante é o fenômeno conhecido como *Single electron tunneling*. (4) Uma situação típica deste fenômeno está ilustrada na figura 1.3, aonde estão representados dois eletrodos metálicos separados por um gap isolante. No meio dos eletrodos existe uma 'ilha' metálica. O arranjo do dispositivo é tal que mesmo tendo-se diferenças de potencial entre os eletrodos, não ocorre o transporte de corrente classicamente. Contudo, quanticamente é possível que um elétron tunele de um dos eletrodos para a ilha e então tunele para o outro eletrodo, gerando assim a possibilidade de observação de uma corrente de tunelamento. Tal fenômeno é a base de um campo de pesquisa conhecido como *single eletronics* com importantes aplicações em metrologia e transporte eletrônico. (5)

Figura 1.3 – Sistema contendo dois eletrodos (fonte e dreno) e uma região metálica intermediária (ilha) separados por regiões isolantes.



Fonte: Elaborada pelo autor

Uma importante característica deste fenômeno é o fato de que até mesmo esta corrente de tunelamento pode ser suprimida devido a um fenômeno conhecido como bloqueio de Coulomb do tunelamento. (4) Tal regime ocorre quando a adição de um elétron extra na

pequena ilha representa um custo muito alto devido a repulsão coulombiana experimentada entre elétrons presentes na ilha. Quando tal custo é muito maior do que a energia térmica do sistema, a dupla ocupação deste torna-se proibitiva energeticamente mesmo quando pequenas diferenças de potencial são aplicadas ao sistema. (6) Esta física tem sido usada para desenvolver-se dispositivos de um único elétron (single — electron devices).

A física nestes dispositivos será o pano de fundo do estudo desenvolvido neste projeto. Como veremos na análise de casos similares ao destes dispositivos, o transporte entre a fonte e o dreno pode ocorrer sem que ocorra ocupação real da região intermediária, o que evita o bloqueio imposto pela inexistência de estados energeticamente em ressonância com a energia inicial da partícula. Além disso, veremos que tal transmissão pode ocorrer com alta fidelidade do estado quântico da partícula. Neste trabalho recuperaremos resultados de tunelamento coerente do poço duplo (7, 3) e da transmissão coerente não-local. (8)

CAPÍTULO 2

MÉTODO NUMÉRICO E PROVA DE CONVERGÊNCIA

Neste capítulo descreveremos o método numérico utilizado na resolução da equação de Schrödinger nos sistemas unidimensionais e ao derivar uma prova para uma condição suficiente para garantir a convergência do método, encontramos o primeiro resultado desta dissertação, pois as provas conhecidas (9) foram demonstradas através da análise da estabilidade da solução (10), o que não permitiu concluir se o limite superior para o passo temporal, aqui chamado de passo temporal crítico, também garantiria a estabilidade das soluções. Através do estudo da convergência conseguimos mostrar de maneira conclusiva que o passo crítico também assegura a estabilidade do método.

2.1 Método de diferenças finitas no domínio temporal (FDTD)

Quando precisamos traduzir equações matemáticas para computadores, temos que levar em conta o fato destes não terem precisão infinita, ou seja, não conseguirem identificar pontos infinitamente próximos, impossibilitando o uso de funções contínuas. Assim, no cálculo da derivada, utilizamos a abstração de calcularmos a diferença de uma dada função em pontos infinitamente próximos, o que caracteriza o cálculo desta operação em um ponto. Temos que traduzir essas abstrações matemáticas de precisão infinita em elementos finitos, daí advém os métodos de diferenças finitas na representação computacional das derivadas que aparecem nas equações diferenciais. Dentre estes, um em particular, muito utilizado no eletromagnetismo na obtenção das soluções das equações de Maxwell, será bastante útil neste projeto, o método de diferenças finitas no domínio temporal (FDTD). (9) Neste

método obtém-se de forma iterativa os valores dos campos em pontos discretos do espaço e do tempo sem a necessidade do uso de matrizes que requerem um maior processamento computacional (e.g. diagonalização de matrizes).

2.1.1 Discretização da equação de Schrödinger

Nosso ponto de partida é a equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo, indicada pela expressão sequinte.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x,t) + V(x)\psi(x,t). \tag{2.1}$$

Por conveniência faremos duas manipulações na expressão acima. A primeira delas será reescrever a equação de Schrödinger em unidades adimensionais $t^{'}=\frac{V_{0}}{\hbar}t$, $x^{'}=\sqrt{\frac{2mV_{0}}{\hbar^{2}}}x$ e $\upsilon(x^{'})=\frac{V(x^{'})}{V_{0}}$,

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t'}(x', t') = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2}(x', t') + \upsilon(x')\psi(x', t'),$$
 (2.2)

onde V_0 é uma constante positiva com unidade de energia. Já a segunda manipulação consistirá em separarmos a função de onda em partes real e imaginária,

$$\psi(x', t') = \psi_R(x', t') + i\psi_l(x', t'), \tag{2.3}$$

com $\psi_R(x^{'},t^{'})$ e $\psi_I(x^{'},t^{'})$ reais. Substituindo 2.3 na equação 2.2 e igualando as partes real e imaginária obtemos o seguinte sistema de equações acopladas.

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t'}(x',t') = -\frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x'^2}(x',t') + \upsilon(x')\psi_I(x',t'),$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t'}(x',t') = \frac{\partial^2 \psi_R}{\partial x'^2}(x',t') + \upsilon(x')\psi_R(x',t'),$$
(2.4)

A implementação do cálculo numérico por FDTD é feita através da discretização das variáveis espaciais e temporais, ou seja, avalia-se a função de onda em pontos discretos diferindo de múltiplos de $\Delta x(\Delta t)$ no espaço(tempo). Para representar a função de onda calculada nestes pontos, introduziremos a notação:

$$\psi(x_l, t_n) = \psi^n(l), \tag{2.5}$$

sendo $x_l = l\Delta x$ e $t_n = n\Delta t$. Agora precisamos aproximar as derivadas pelo quociente de diferenças finitas, para fazê-lo partiremos da série de Taylor:

$$f(x_0 + \epsilon) = f(x_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \epsilon + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \epsilon^2 + \dots,$$

$$f(x_0 - \epsilon) = f(x_0) - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \epsilon + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \epsilon^2 - \dots.$$
(2.6)

Através destas equações pode-se escrever expressões para as derivadas de várias maneiras distintas. Duas delas, também conhecidas como derivada por diferenças progressivas e regressivas, possuem erro de ordem superior ou igual a 1 no desvio ϵ , como pode ser facilmente observado nas equações obtidas diretamente de 2.6:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} = \frac{f(x_0 + \epsilon) - f(x_0)}{\epsilon} + O(\epsilon),$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \epsilon)}{\epsilon} + O(\epsilon).$$
(2.7)

Uma outra maneira, conhecida como diferenças centradas, tem a seguinte definição.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} = \frac{f(x_0 + \epsilon) - f(x_0 - \epsilon)}{2\epsilon} + O(\epsilon^2). \tag{2.8}$$

Note que neste o caso o erro é de ordem superior a 2, de modo que quando truncamos a série para construir as derivadas numericamente, o método de diferenças centradas acaba sendo a opção mais precisa, assim utilizaremos esta opção para a derivada temporal. Juntando-se 2.5 e 2.8 obtemos as seguintes expressões para a derivada temporal:

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t'}(x_l, t_{n+1/2}) \approx \frac{\psi_R^{n+1}(l) - \psi_R^n(l)}{\Delta t'},$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t'}(x_l, t_n) \approx \frac{\psi_I^{n+1/2}(l) - \psi_I^{n-1/2}(l)}{\Delta t'}.$$
(2.9)

Note que por conveniência avaliamos a parte imaginária da função de onda a meios intervalos de tempo. Com relação a derivada segunda espacial temos o seguinte:

$$\frac{\partial^{2} \psi_{R}}{\partial x^{'2}}(x_{l}, t_{n}) \approx \frac{\psi_{R}^{n}(l+1) - 2\psi_{R}^{n}(l) + \psi_{R}^{n}(l-1)}{\Delta x^{'2}}$$

$$\frac{\partial^{2} \psi_{I}}{\partial x^{'2}}(x_{l}, t_{n+1/2}) \approx \frac{\psi_{I}^{n+1/2}(l+1) - 2\psi_{I}^{n+1/2}(l) + \psi_{I}^{n+1/2}(l-1)}{\Delta x^{'2}} \tag{2.10}$$

Substituindo estas expressões na equação de Schrödinger e isolando $\psi_l^{n+1/2}(l)$ e $\psi_R^{n+1}(l)$, obtemos as sequintes expressões.

$$\psi_{l}^{n+1/2}(l) = c_{1}[\psi_{R}^{n}(l+1) - 2\psi_{R}^{n}(l) + \psi_{R}^{n}(l-1)] - c_{2}\upsilon(l)\psi_{R}^{n}(l) + \psi_{l}^{n-1/2}(l),$$

$$\psi_{R}^{n+1}(l) = -c_{1}[\psi_{l}^{n+1/2}(l+1) - 2\psi_{l}^{n+1/2}(l) + \psi_{l}^{n+1/2}(l-1)]$$

$$+ c_{2}\upsilon(l)\psi_{l}^{n+1/2}(l) + \psi_{R}^{n}(l),$$
(2.11)

sendo $c_1 = \frac{\Delta t'}{2\Delta x'^2}$ e $c_2 = \Delta t'$. Note que $\psi_R^n(l)$ e $\psi_I^{n-1/2}(l)$ representam o presente da função de onda, enquanto que as funções $\psi_R^{n+1}(l)$ e $\psi_I^{n+1/2}(l)$ representam o futuro. As equações 2.11 tratam-se de equações de atualização temporal da função de onda para a posição $x_l = l\Delta x$. Assim sendo, encontramos primeiro $\psi_I^{n+1/2}(l)$ e com este em mãos calculamos $\psi_R^n(l)$. Repetimos este processo até atingirmos o tempo de evolução requerido no problema, isso sem a necessidade de recorrer a uma álgebra matricial e muito menos diagonalização de matrizes.

2.2 Prova da convergência do método

Todo cálculo numérico incorre em erros. Como vimos na seção anterior, no método de diferenças finitas este erro está associado à aproximação da derivada de uma função por um operador de diferenças finitas. Como visto anteriormente, este erro é tanto menor quanto menor for a diferença finita utilizada na discretização do domínio considerado. Contudo, a diminuição do passo eleva o custo computacional e consequentemente inviabiliza o tratamento do problema. Por outro lado, no outro extremo, o aumento indiscriminado dos passos temporal e espacial faz com que a solução numérica obtida através do esquema divirja, perdendo o significado físico. Deste modo, mantendo-se em mente que ambos os extremos de tamanho para os passos espaciais(temporais) possuem seus respectivos problemas associados, torna-se desejável determinar qual o maior passo possível para o qual as soluções ainda sejam satisfatórias. Além disso, como a equação de Schrödinger envolve derivadas espaciais e temporais, tem-se como consequência a existência de um vínculo entre os passos Δx e Δt de tal maneira que o método de diferenças finitas seja consistente e estável. Um esquema de diferenças finitas é dito consistente se a solução exata da equação diferencial parcial satisfaz o esquema determinado pelo método, i.e. eqs.

2.11, quando Δx e Δt convergem para zero e é dito estável quando pequenas variações na condição inicial implicam em pequenas mudanças na solução obtida através do método. Um teorema importante para o método de diferenças finitas é o teorema da equivalência de Lax que diz que um sistema de diferenças finitas é convergente se e somente se ele é consistente e estável. Desta maneira, se conseguirmos determinar e provar as condições para que nosso sistema de diferenças finitas seja convergente quando aplicado na equação de Schrödinger, poderemos utilizá-lo ao longo deste projeto.

Proposição: O esquema de diferenças finitas aplicado a equação de Schrödinger é convergente se

$$0 \leqslant \Delta t' \left(\frac{4}{\Delta x'^2} + \max |\upsilon| \right) \leqslant 2. \tag{2.12}$$

Prova: Seja $\psi(x',t')$ a solução exata da equação de Schrödinger 2.2 apresentada anteriormente e $\phi^n(l) = \phi(x'_l,t'_n)$ a solução aproximada obtida através do esquema de diferenças finitas. Assim, a solução aproximada será uma boa aproximação se tivermos a seguinte desigualdade satisfeita,

$$||\psi(x_l, t_n) - \phi^n(l)||_{\infty} < \epsilon, \tag{2.13}$$

onde ϵ é uma tolerância especificada e a norma com subíndice ∞ é chamada de norma do sup ou norma do máximo e é definida por:

$$||z||_{\infty} = \max\{|z_l^n| : \forall l, n\}.$$
 (2.14)

Note também que embora o domínio da solução exata $\psi(x',t')$ seja contínuo aqui ela é somente avaliada nos pontos $(x_l^{'},t_n^{'})$ escolhidos para a realização do cálculo numérico. Assim, um sistema de diferenças finitas é dito convergente se para todos $(x^{'},t^{'})$ a solução aproximada converge para a solução exata quando $\Delta x^{'}, \Delta t^{'} \rightarrow 0$.

Partindo da série de Taylor calculamos as derivadas da solução exata $\psi(x_l^{'},t_n^{'})$,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t'}(x'_l, t'_n) = \frac{\psi_l^{n+1} - \psi_l^n}{\Delta t'} + O(\Delta t'), \qquad (2.15)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^{'2}}(x_l^{'}, t_n^{'}) = \frac{\psi_{l+1}^n - 2\psi_l^n + \psi_{l-1}^n}{\Delta x^{'2}} + O(\Delta x^{'2}), \tag{2.16}$$

substituindo 2.15 e 2.16 na equação de Schrödinger temos,

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t'}(x'_{l},t'_{n}) + \frac{\partial^{2}\psi}{\partial x'^{2}}(x'_{l},t'_{n}) - \upsilon(x'_{l})\psi(x'_{l},t'_{n}) = i\left(\frac{\psi_{l}^{n+1} - \psi_{l}^{n}}{\Delta t'}\right) + \left(\frac{\psi_{l+1}^{n} - 2\psi_{l}^{n} + \psi_{l-1}^{n}}{\Delta x'^{2}}\right) - \upsilon_{l}\psi_{l}^{n} + O(\Delta t') + O(\Delta x'^{2}).$$
(2.17)

Contudo, como ψ_l^n é por hipótese a solução exata da equação de Schrödinger, tem-se que o lado esquerdo da equação 2.17 é nulo,

$$0 = i\left(\frac{\psi_{l}^{n+1} - \psi_{l}^{n}}{\Delta t'}\right) + \left(\frac{\psi_{l+1}^{n} - 2\psi_{l}^{n} + \psi_{l-1}^{n}}{\Delta x'^{2}}\right) - \upsilon_{l}\psi_{l}^{n} + O(\Delta t') + O(\Delta x'^{2}).$$
(2.18)

Resolvendo esta equação para ψ_I^{n+1} temos:

$$\psi_{l}^{n+1} = \left[1 - i\left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t'\upsilon_{l}\right)\right]\psi_{l}^{n} + i\frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}}\left(\psi_{l+1}^{n} + \psi_{l-1}^{n}\right) + O(\Delta t'^{2}) + O(\Delta t'\Delta x'^{2}). \quad (2.19)$$

Do mesmo modo, a solução aproximada é obtida através da iteração de:

$$\phi_{l}^{n+1} = \left[1 - i\left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t'\upsilon_{l}\right)\right]\phi_{l}^{n} + i\frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}}\left(\phi_{l+1}^{n} + \phi_{l-1}^{n}\right). \tag{2.20}$$

Subtraindo-se 2.20 de 2.19 e definindo $z_l^n \equiv \psi_l^n - \phi_l^n$ obtemos a seguinte expressão:

$$z_{l}^{n+1} = \left[1 - i\left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t'\upsilon_{l}\right)\right]z_{l}^{n} + i\frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}}\left(z_{l+1}^{n} + z_{l-1}^{n}\right) + O(\Delta t'^{2}) + O(\Delta t'\Delta x'^{2}). \quad (2.21)$$

Passando z^n para o lado esquerdo da equação e tomando o módulo,

$$|z_{l}^{n+1} - z_{l}^{n}| = \left| -i \left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \upsilon_{l} \right) z_{l}^{n} + i \frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}} \left(z_{l+1}^{n} + z_{l-1}^{n} \right) + O(\Delta t'^{2}) + O(\Delta t'^{2}) \right|. \tag{2.22}$$

Usando a desigualdade triangular temos

$$|z_{l}^{n+1} - z_{l}^{n}| \leq \left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t'|v_{l}|\right)|z_{l}^{n}| + \frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}}\left(|z_{l+1}^{n}| + |z_{l-1}^{n}|\right) + C(\Delta t'^{2} + \Delta t'\Delta x'^{2}), \quad (2.23)$$

onde \mathcal{C} é uma constante positiva de maneira a garantir a desigualdade. Observe que podemos escrever

$$|z_{l}^{n+1} - z_{l}^{n}| \leq \left(\frac{2\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \max|\upsilon|\right) |z_{l}^{n}| + \frac{\Delta t'}{\Delta x'^{2}} \left(|z_{l+1}^{n}| + |z_{l-1}^{n}|\right) + C(\Delta t'^{2} + \Delta t' \Delta x'^{2}). \tag{2.24}$$

Substituímos na expressão 2.24 o módulo sup espacial de z_{l-1}^n, z_l^n e z_{l+1}^n em um dado tempo t_n .

$$|z_{l}^{n+1} - z_{l}^{n}| \leq \left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \max|\upsilon|\right) ||z^{n}||_{\infty} + C(\Delta t'^{2} + \Delta t' \Delta x'^{2}). \tag{2.25}$$

Usando novamente a desigualdade triangular,

$$|z_l^{n+1} - z_l^n| \leqslant |z_l^{n+1}| + |z_l^n| \leqslant ||z^n||_{\infty} + ||z^n||_{\infty}.$$
(2.26)

Perceba que se encontrarmos uma condição que garanta a seguinte desigualdade,

$$||z^{n+1}||_{\infty} + ||z^{n}||_{\infty} \leqslant \left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \max|\upsilon|\right) ||z^{n}||_{\infty} + C(\Delta t'^{2} + \Delta t' \Delta x'^{2}), \tag{2.27}$$

automaticamente garantiremos a desigualdade original 2.25. Fazendo a análise da desiqualdade 2.27 temos,

$$||z^{n+1}||_{\infty} \leq \left[\left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \max |v| \right) - 1 \right] ||z^{n}||_{\infty} + C(\Delta t'^{2} + \Delta t' \Delta x'^{2}),$$

$$\leq \left| \left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^{2}} + \Delta t' \max |v| \right) - 1 \right| ||z^{n}||_{\infty} + C(\Delta t'^{2} + \Delta t' \Delta x'^{2}). \tag{2.28}$$

Definindo $\sigma \equiv \left| \left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^2} + \Delta t' \max |\upsilon| \right) - 1 \right|$

$$||z^{n+1}||_{\infty} \le \sigma ||z^{n}||_{\infty} + C(\Delta t^{2} + \Delta t^{2} \Delta x^{2}),$$
 (2.29)

aplicando esta desigualdade de maneira iterativa obtemos:

$$||z^{n+1}||_{\infty} \leq \sigma^{2}||z^{n-1}||_{\infty} + (1+\sigma)C(\Delta t^{'2} + \Delta t^{'}\Delta x^{'2})$$

$$\leq \sigma^{3}||z^{n-2}||_{\infty} + (1+\sigma+\sigma^{2})C(\Delta t^{'2} + \Delta t^{'}\Delta x^{'2})$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$\leq \sigma^{n+1}||z^{0}||_{\infty} + \left(\sum_{i=0}^{N} \sigma^{i}\right)C(\Delta t^{'2} + \Delta t^{'}\Delta x^{'2}), \tag{2.30}$$

como ψ e ϕ satisfazem a mesma condição inicial, tem-se que $z^0=0$,

$$||z^{n+1}||_{\infty} \le \left(\sum_{i=0}^{N} \sigma^{i}\right) C(\Delta t^{2} + \Delta t^{2} \Delta x^{2}).$$
 (2.31)

Note que se $\sigma \leqslant 1 \Rightarrow \sum_{i=0}^{N} \sigma^{i} \leqslant N + 1$, portanto,

$$||z^{n+1}||_{\infty} \leq (N+1)\Delta t' C(\Delta t' + \Delta t' \Delta x'^{2}).$$
 (2.32)

Outro ponto importante é que $(N+1)\Delta t' \to t'$ quando $\Delta t' \to 0$ $(N \to \infty)$ pois $\Delta t' = \frac{t'}{N}$. Assim, quando $\Delta t', \Delta x' \to 0$, tem-se que $||z^{n+1}||_{\infty} \to 0$, mostrando que o esquema de diferenças finitas proposto converge para a solução exata e consequentemente é estável e consistente, caso a condição $\sigma \leqslant 1$ seja satisfeita. Note que se esta condição não for satisfeita, por exemplo $\sigma = 2$, o somatório $\sum_{i=0}^{N} \sigma^i$ adquire uma dependência funcional exponencial com N,

$$\sum_{i=0}^{N} \sigma^{i} = 2^{0} + \dots + 2^{N}, \tag{2.33}$$

enquanto que o passo temporal continua com a mesma dependência $\Delta t^{'}=\frac{t^{'}}{N}$, assim o termo $\sum_{i=0}^{N}\sigma^{i}\Delta t^{'}\to\infty$ resultando em $||z^{n+1}||_{\infty}$ divergente e sem significado físico.

Partindo da desigualdade $\sigma \leqslant 1$ obtemos então,

$$\sigma = \left| \left(\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^2} + \Delta t' \max |\upsilon| \right) - 1 \right| \leq 1$$

$$-1 \leq \frac{4\Delta t'}{\Delta x'^2} + \Delta t' \max |\upsilon| - 1 \leq 1$$

$$0 \leq \frac{4\Delta t'}{\Delta x'^2} + \Delta t' \max |\upsilon| \leq 2.$$

Assim, nossa análise conseguiu verificar a condição para a convergência do método de diferenças finitas. Como mencionado, outros trabalhos (9) trataram do problema através da perspectiva da estabilidade do método (10), obtendo relações similares, mas não conseguindo serem conclusivos sobre se a condição

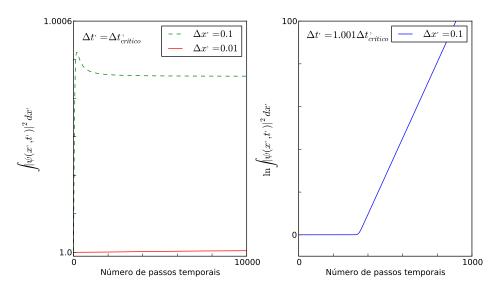
$$\frac{4\Delta t'}{\Delta x'^2} + \Delta t' \max |v| = 2 \tag{2.34}$$

também garantiria a estabilidade do método. Deste modo nosso resultado representa um progresso, dado que podemos de maneira conclusiva estabelecer que tal condição garante a estabilidade/convergência do método.

2.3 Teste de convergência

Apresentamos um teste computacional para este critério de convergência utilizando a simulação empregada ao longo deste trabalho. O teste consiste em evoluir um pacote gaussiano em um dado potencial e ver como o módulo da função de onda ao quadrado integrado em todo o espaço (finito computacionalmente) se comporta conforme aumentamos o número de passos temporais para um dado passo temporal. O primeiro potencial testado é um potencial constante e igual a zero com condição inicial $\psi_0(x') = \pi^{1/4} e^{-(x'-x_0')^2/2} e^{ix'}$. Simulamos primeiro com passo temporal igual ao passo crítico $\Delta t'_{crítico}$ e vemos que a simulação converge, vemos também que a convergência é mais precisa para um valor de passo espacial $\Delta x'$ menor. Ainda neste potencial repetimos a simulação mas agora com passo temporal $\Delta t' = 1.001 \Delta t'_{crítico}$ e vemos que o potencial diverge por volta de 380 passos.

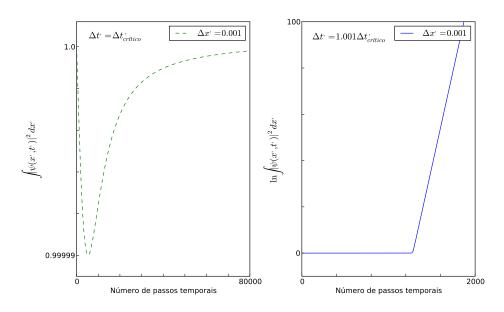
Figura 2.1 – Teste de convergência do método utilizado na resolução da equação de Schrödinger para potencial constante e igual a zero em dois passos temporais diferentes. O primeiro gráfico (esquerda) mostra a evolução da ocupação em todo o espaço da função de onda quando $\Delta t' = \Delta t'_{crítico}$ como função da quantidade de passos temporais, e vemos que o método converge. Observamos também que a convergência é mais precisa para um valor de $\Delta x'$ menor, como previsto anteriormente. Medimos a mesma coisa no gráfico seguinte mas agora com $\Delta t' = 1.001\Delta t'_{crítico}$ e vemos que neste caso a solução começa a divergir por volta de 380 passos temporais.



Fonte: Elaborado pelo autor

Na segunda simulação usamos o potencial harmônico $v(x')=(137/2)x^2$ e condição inicial $\psi_0(x')=(1/2\pi)^{1/4}e^{-x'^2/4}$.

Figura 2.2 – Teste de convergência do método utilizado na resolução da equação de Schrödinger para potencial harmônico em dois passos temporais diferentes. O primeiro gráfico (esquerda) mostra a evolução da ocupação em todo o espaço da função de onda quando $\Delta t^{'}=\Delta t^{'}_{crítico}$ como função da quantidade de passos temporais, e vemos que o método converge. Medimos a mesma coisa no gráfico seguinte mas agora com $\Delta t^{'}=1.001\Delta t^{'}_{crítico}$ e vemos que neste caso a solução começa a divergir por volta de 1300 passos temporais.



CAPÍTULO 3

PROCESSOS DE TUNELAMENTO EM POTENCIAIS COM REGIÕES INTERMEDIÁRIAS CONFINANTES

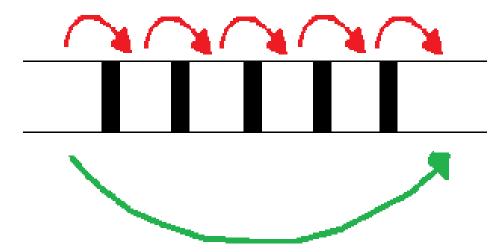
Neste capítulo discutiremos a física de processos de tunelamento de altas ordens, também conhecidos como cotunelamento (4, 11), que podem ocorrer em sistemas cujos potenciais apresentam regiões intermediárias confinantes. Fazendo uma modelagem de estados quase-localizados, mostraremos que o processo de cotunelamento é bem caracterizado por processos de transições virtuais. (Neste capítulo as quantidades físicas posição, tempo e energia serão representadas pelas grandezas adimensionais introduzidas no capítulo anterior).

3.1 Diferenças entre tunelamento e cotunelamento

Todo o sucesso da mecânica quântica na descrição de sistemas físicos vem acompanhado de certa estranheza devido a sua enorme discrepância com relação a visão cotidiana clássica. Dentre essas estranhezas uma em específico e especial para este projeto é o fenômeno do tunelamento quântico, no qual uma partícula consegue ultrapassar uma barreira de potencial mesmo sem energia suficiente para fazê-lo. Dependendo das condições impostas ao sistema, tal fenômeno pode apresentar uma rica física contendo diferentes processos. Um paradigma de sistema que pode apresentar tais processos é o ilustrado na figura 3.1, tratando-se de uma composição de "ilhas" de materiais condutores separadas por regiões isolantes (faixas pretas), que fazem o papel de barreiras de potencial impostas

ao movimento de elétrons ao longo da cadeia.

Figura 3.1 — Gráfico contendo as regiões ocupáveis, regiões brancas, e regiões isolantes não ocupáveis, faixas pretas, que fazem o papel das barreiras de potenciais. As setas interligando regiões brancas adjacentes (separadas por uma faixa preta) representam o tunelamento, enquanto que as setas interligando regiões não adjacentes representam o cotunelamento ou tunelamento de ordem superior.



Fonte: Elaborada pelo autor

Observe que neste ambiente o tunelamento usual, aquele no qual a partícula salta entre duas ilhas vizinhas, naturalmente está presente se a energia da partícula estiver abaixo da barreira de potencial imposta pela região isolante que separa as ilhas. Tal processo é representado esquematicamente pelas setas vermelhas na figura 3.1. Supondo o sistema isolado, a energia da partícula nesse processo tem que ser conservada. Assim, dependendo das condições impostas a cada ilha, tal fenômeno pode até mesmo vir a ser suprimido. Um exemplo típico deste caso ocorre quando a capacitância associada à ilha é muito pequena, de tal modo que o custo energético de se colocar um elétron extra dentro de uma ilha $(e^2/2C)$ acaba impedindo que o tunelamento ocorra (fenômeno do bloqueio de Coulomb devido à repulsão Coulombiana dos elétrons presentes na ilha). Contudo, observe que o esquema da fig. 3.1 induz claramente que este não deve ser o único processo possível para o transporte de uma partícula de uma região à outra do sistema. De fato, uma outra possibilidade é que ocorra um processo de tunelamento no qual a partícula transpassa várias ilhas, podendo inclusive saltar de uma extremidade a outra (processo indicado pela seta verde da fig. 3.1). Assim, tais processos constituem tunelamentos de ordem superior, nos quais as partículas realizam saltos entre sítios não vizinhos sem ter que ocupar a região intermediária entre eles. Como veremos mais adiante, tais tunelamentos de ordem

superior podem ser descritos através da ocupação virtual das ilhas intermediárias. Como bem sabido (12), processos virtuais não precisam satisfazer princípios de conservação, desde que o processo resultante final seja consistente com estes. Assim, na perspectiva de uma teoria de perturbação (12), um elemento típico para a amplitude de transição entre extremos da cadeia (aqui chamados de emissor e receptor) teria a forma

$$\sum_{inter} \frac{\langle receptor | \hat{H} | inter \rangle \langle inter | \hat{H} | emissor \rangle}{(E_{receptor} - E_{inter})^2}.$$
 (3.1)

Deste modo, um tunelamento de ordem superior, que passaremos a chamar de cotunelamento, pode vir a suplantar possíveis bloqueios impostos à ocupação real da região intermediária.

3.2 Tunelamento de 1^a ordem

De maneira a caracterizar claramente o tunelamento de ordem superior, façamos uma breve análise da física do tunelamento usual ou de 1^a ordem. O sistema mais simples no qual tal processo é observado é aquele em que uma partícula encontra uma única barreira de potencial (fig. 3.2), cuja altura é maior do que a energia da partícula.

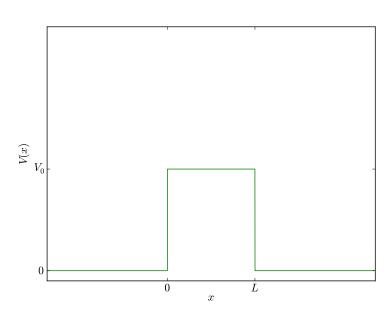


Figura 3.2 – Barreira simples.

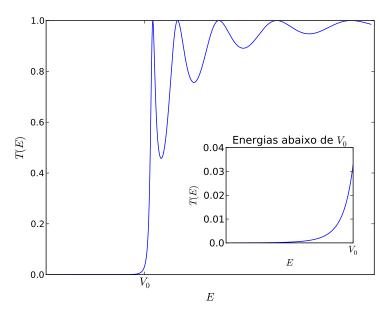
Fonte: Elaborada pelo autor

Da análise do problema, sabe-se que o espectro de energia da partícula forma um contínuo com $E\geqslant 0$. Além disso, as soluções estacionárias da equação de Schrödinger para este potencial revelam que há uma probabilidade não-nula de encontrar-se a partícula em ambos os lados da barreira, mesmo quando considera-se o caso de uma partícula incidindo de um dos lados da barreira tendo $E< V_0$ (o que difere do comportamento clássico em que a partícula deveria ficar confinada em apenas uma região). Assumindo-se que a partícula atinge a barreira da esquerda para a direita, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo tem o seguinte formato:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} &, x < 0 \\ Ce^{qx} + De^{-qx} &, 0 < x < L \\ Fe^{ikx} &, x > L \end{cases}$$
(3.2)

com $k^2 = E$ e $q^2 = (V_0 - E)$, e com constantes A, B, C, D e F a serem determinadas usandose condições de continuidade da função de onda e de sua derivada e a normalização da função de onda. Outro cálculo interessante é o da transmissão através da barreira, em que resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo, e comparamos o módulo do coeficiente incidente (aquele que multiplica e^{ikx} a esquerda da barreira, supondo que a partícula atinja a barreira pela esquerda – coeficiente A no nosso caso) com o módulo do coeficiente transmitido (aquele que multiplica e^{ikx} a direita da barreira – coeficiente F). Um típico gráfico da transmissão $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ como função da energia da partícula incidente é mostrado na fig. 3.3, onde vemos que mesmo para energias abaixo da barreira de potencial a transmissão é diferente de zero, indicando a existência do tunelamento. Vale mencionar que os casos em que ocorrem 100% de transmissão acontecem apenas quando $E \geqslant V_0$, i.e., a energia da partícula incidente é maior do que a altura da barreira de potencial.

Figura 3.3 – Típico comportamento do coeficiente de transmissão da partícula através da barreira simples de altura V_0 e largura L (conforme figura 3.2) como função da energia da partícula incidente. Note que mesmo para energias abaixo de V_0 ainda existe transmissão, caracterizando o tunelamento (a rigor a transmissão só vai a zero para energia nula, ou seja, não existe partícula).



3.3 Barreira dupla e o cotunelamento

O sistema mais simples no qual um processo de tunelamento de ordem superior pode ocorrer é aquele no qual o potencial é composto por duas barreiras de altura V_1 e largura t, sendo estas separadas por uma região intermediária de altura V_0 e largura 2d (fig. 3.4), matematicamente definido por.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x| > d + t \\ V_0 & , |x| < d \\ V_1 & , -d - t < x < -d \ e \ d < x < d + t \end{cases}$$
 (3.3)

Note que se $V_0 = V_1$, o nosso problema volta a ser aquele de uma barreira simples. Novamente, da análise do problema obtém-se que o espectro de energia do sistema forma um contínuo com $E \geqslant 0$. Neste caso, resolvendo-se a equação de Schrödinger de maneira análoga a anterior, temos as sequintes expressões para as autofunções supondo uma

partícula incidindo da esquerda pra direita com energia $V_0\leqslant E\leqslant V_1$,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} &, x < -d - t \\ Ce^{qx} + De^{-qx} &, -d - t < x < -d \end{cases}$$

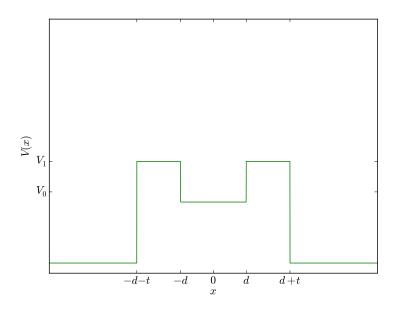
$$Fe^{ipx} + Ge^{-ipx} &, -d < x < d$$

$$He^{qx} + Je^{-qx} &, d < x < d + t$$

$$Me^{ikx} &, x > d + t \end{cases}$$
(3.4)

sendo $k=\sqrt{E}$, $q=\sqrt{V_1-E}$ e $p=\sqrt{E-V_0}$. Aqui temos nove incógnitas a serem determinadas, obtemos oito delas usando as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada, e a última através da normalização da função de onda.

Figura 3.4 – Barreira dupla com região intermediária não nula.

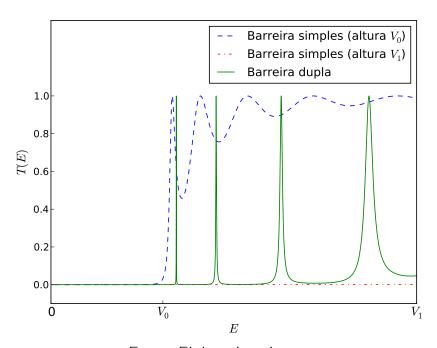


Fonte: Elaborada pelo autor

O comportamento típico do coeficiente de transmissão para este potencial é apresentado na fig. 3.5. Observa-se, então que, mesmo para valores de energia abaixo da altura máxima da barreira (i.e., $E < V_1$), há casos para os quais a transmissão é 100%. Perceba que tal fenômeno não está presente no caso de uma barreira simples (fig. 3.2), onde os casos T=1 só ocorrem se a energia da partícula estiver acima da barreira. Ainda quando comparamos o resultado do coeficiente de transmissão da barreira dupla com o obtido para uma barreira simples, só que agora com altura V_0 , verificamos que não há qualquer correla-

ção entre os picos de transmissão observados (fig. 3.5). Este resultado revela que a região confinante deve desempenhar papel crucial neste regime de energia, i.e., $V_0\leqslant E\leqslant V_1$. De fato, tal conclusão é confirmada quando notamos que os valores de energia para os quais T=1 na fig. 3.5 estão muito próximos daqueles associados aos autoestados de energia do problema de uma partícula ligada a um poço de potencial de profundidade V_1-V_0 . Deste modo, este resultado nos fornece a perspectiva de que há um fenômeno de ressonância ocorrendo quando o valor da energia da partícula está muito próximo daquele associado à região intermediária, que tem caráter confinante. Observe então que, apesar do espectro do sistema total (fig. 3.4) ser contínuo e da região intermediária ser acessível à partícula para valores de energia $E>V_0$, o resultado da transmissão indica que a sua ocupação real só será favorecida quando tivermos uma partícula incidente com valores de energia que casarem com a escala de energia da região intermediária. Esta é a perspectiva que seguiremos ao modelar a transmissão de uma partícula neste sistema através de processos de ocupação virtual.

Figura 3.5 – Linhas interrompidas: Coeficiente de transmissão $(T(E) = \frac{|M|^2}{|A|^2})$ com relação a energia da partícula incidente para duas barreiras simples, uma com altura V_0 e outra com altura V_1 (ambas com comprimento 2(d+t)). Linha sólida: Coeficiente de transmissão para um sistema de barreiras duplo com região intermediária de altura V_0 e largura 2d e barreiras externas de altura V_1 e largura t conforme indicado na figura t.



Fonte: Elaborada pelo autor

3.4 Oscilador harmônico duplo assimétrico

Antes de seguirmos com a modelagem dos processos de ocupação virtual, faremos a análise da dinâmica de uma partícula na presença de um potencial de oscilador duplo assimétrico (fig. 3.6). (7, 13) Nosso intuito aqui é duplo:

- (i) Ao reproduzir os resultados obtidos por Nieto e colaboradores (13), validamos o programa utilizado para simular numericamente a dinâmica de uma partícula em um potencial unidimensional, além de confirmarmos mais uma vez o resultado do capítulo anterior: o de que o passo crítico também garante a estabilidade do método (usamos $\Delta t_{crítico}$);
- (ii) Este potencial permite o estudo de tunelamento ressonante, o que nos ajuda a consolidar a física que queremos descrever no cotunelamento.

O potencial de oscilador duplo assimétrico utilizado é dado pela seguinte expressão:

$$V(x) = \begin{cases} (x+2)^2 + U & , x \le 0 \\ [x - (4+U)^{1/2}]^2 & , x > 0 \end{cases}$$
 (3.5)

Através da expressão do potencial vemos que a assimetria entre as duas parábolas se dá de duas maneiras, mas ambas dependentes do parâmetro U. A primeira assimetria se dá através de um deslocamento vertical devido ao termo constante dependente de U. A outra se dá no alargamento de uma das parábolas devido a existência de termos lineares na parábola (V(x>0)) proporcionais a U. Note também que quando U=0 o potencial recai no sistema simétrico de duas parábolas. Na fig. 3.6 vê-se como essa assimetria se comporta conforme variamos U.

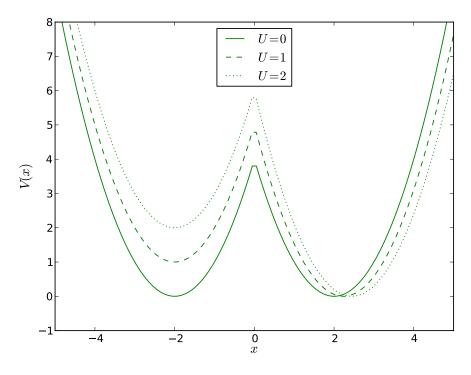


Figura 3.6 – Variação do potencial parabólico duplo com o parâmetro de assimetria U.

3.5 Recuperando resultados

Nesta seção recuperamos não apenas os resultados do oscilador harmônico duplo assimétrico (13) como estudamos a dinâmica de tunelamento coerente no poço duplo quadrado. Todos estes associados com o processo de tunelamento presente no problema da barreira simples (tunelamento de 1ª ordem).

Começamos com as simulações para o oscilador harmônico duplo simétrico. Considerando a partícula inicialmente localizada na parábola da esquerda, tendo como condição inicial o estado fundamental do oscilador harmônico $\psi_0 = \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}(x+2)^2}$ centrado em x=-2, colocamos o sistema pra evoluir temporalmente. Observa-se, então, que haverá um movimento oscilatório da partícula entre um poço e outro, uma vez que o estado inicial não é um autoestado do problema. Observamos uma completa transmissão do estado entre um poço e outro. Para visualizar isto graficamos a ocupação espacial da função de onda em ambas as parábolas como função do tempo. A ocupação espacial é calculada integrando-se o módulo ao quadrado da função de onda na região de interesse, a ocupação da esquerda é dada por $P_{esq} = \int_{-\infty}^{0} |\psi(x,t)|^2 dx$ e a direita $P_{dir} = \int_{0}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$, computacionalmente

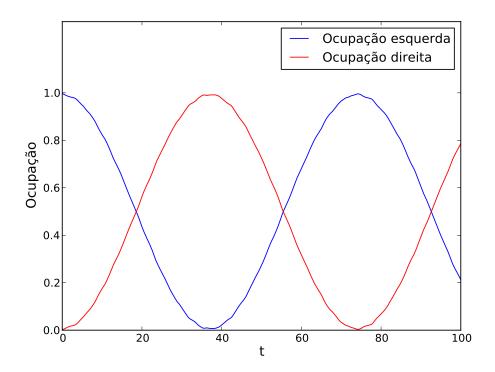
estas expressões adquirem o sequinte formato:

$$P_{esq} = \sum_{n=0}^{N/2} |\psi(n\Delta x, t)|^2 \Delta x,$$
 (3.6)

$$P_{dir} = \sum_{n=N/2}^{N} |\psi(n\Delta x, t)|^2 \Delta x.$$
 (3.7)

Para este problema calculamos o tempo de tunelamento τ , que definimos como o tempo necessário para que a partícula passe completamente para a direita (parábola oposta a ocupada pela condição inicial). A fig. 3.7 mostra a evolução temporal das ocupações.

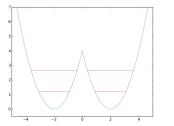
Figura 3.7 – Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para o sistema simétrico (U=0). Tempo de tunelamento $\tau=37,5$.

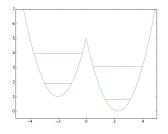


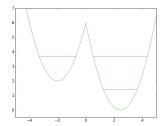
Fonte: Elaborada pelo autor

Esta transmissão completa acontece devido ao fato dos níveis de energia da parábola da esquerda coincidirem com os níveis de energia da parábola da direita (níveis de energia das parábolas isoladas do restante do sistema). Sempre que atingimos esta configuração dizemos que o sistema está em condição de ressonância e a transmissão da função de onda é completa.

Figura 3.8 – Níveis de energia das parábolas isoladas do restante do sistema em três configurações distintas simuladas em nosso trabalho. (a) Primeira condição de ressonância (U=0), (b) Fora de ressonância (U=1) e (c) segunda condição de ressonância (U=2).

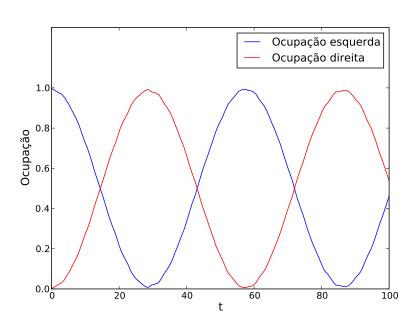






Fizemos o mesmo procedimento para a assimetria ressonante seguinte (U=2), assimetria na qual o estado fundamental do poço esquerdo está em ressonância com o primeiro estado excitado do poço do lado direito (ver figura 3.8). Nesta condição a transmissão completa da função de onda volta a ocorrer. Graficamos (fig. 3.9) novamente a ocupação das duas parábolas como função do tempo.

Figura 3.9 – Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para uma assimetria de U=2. Tempo de tunelamento $\tau=28,2$.

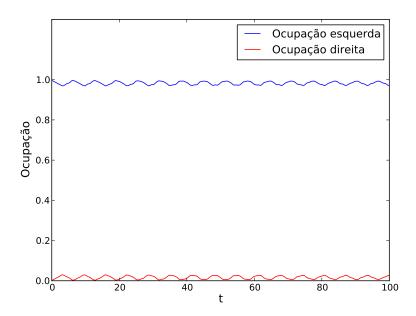


Fonte: Elaborada pelo autor

Os tempos de tunelamento obtidos para U=0 e U=2 valem aproximadamente 37,5 e 28,2 respectivamente. Observe que tal diminuição do tempo de tunelamento era esperada, pois a barreira de potencial que a partícula tem para tunelar no caso assimétrico é menor do que a presente no caso simétrico.

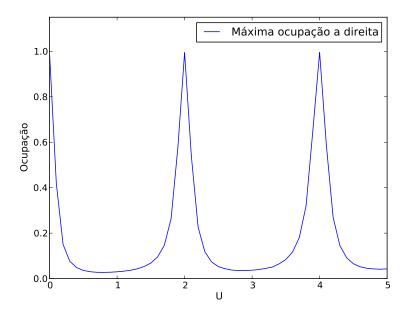
Finalmente, repetimos o gráfico anterior para uma assimetria não ressonante U=1 (fig. 3.10) e recuperamos a transmissão máxima de aproximadamente 3, 1% conforme obtida no trabalho de Nieto (13), assim como reproduzimos a dependência da máxima ocupação da parábola da direita (máxima probabilidade de transmissão) como função da assimetria U. (fig. 3.11)

Figura 3.10 – Gráfico da ocupação das duas parábolas como função do tempo para uma assimetria de U=1. Transmissão máxima de 3,1%.



Fonte: Elaborada pelo autor

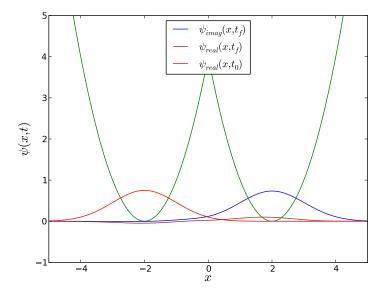
Figura 3.11 — Gráfico contendo a máxima ocupação da parábola a direita (máxima probabilidade de transmissão) como função da assimetria do sistema de parábolas.



3.5.1 Transmissão coerente e incoerente no oscilador duplo

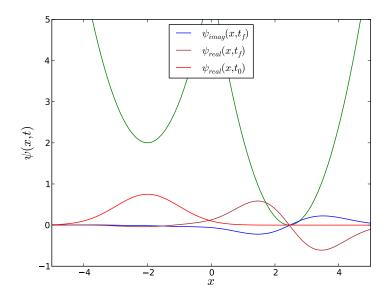
Também recuperamos através das simulações anteriores as transmissões coerente e incoerente do trabalho. (13) A transmissão coerente se caracteriza pelo fato do formato do módulo ao quadrado da função de onda se preservar após transpassar a barreira através do tunelamento. A transmissão coerente acontece para o potencial simétrico (U=0) como observado na fig. 3.12.

Figura 3.12 – Gráfico contendo as funções de onda no instante inicial t=0 e depois de evoluídas temporalmente até atingir o tempo de tunelamento t=38 (Tempo necessário para que haja a primeira máxima ocupação da parábola a direita) para sistema de parábolas simétrico.



Agora (fig. 3.13) na assimetria ressonante U=2, apesar da transmissão da função de onda ser completa, ela não tem seu formato preservado, caracterizando a transmissão incoerente.

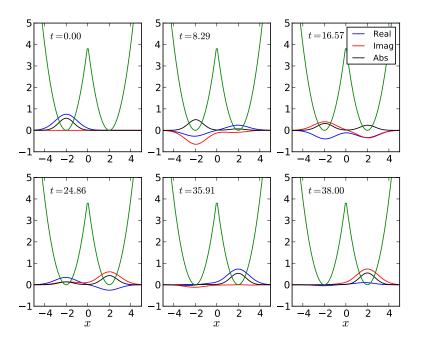
Figura 3.13 – Gráfico contendo as funções de onda no instante inicial t=0 e depois de evoluídas temporalmente até atingir o tempo de tunelamento t=28 (Tempo necessário para que haja a primeira máxima ocupação da parábola a direita) para sistema de parábolas com assimetria U=2.



Fonte: Elaborada pelo autor

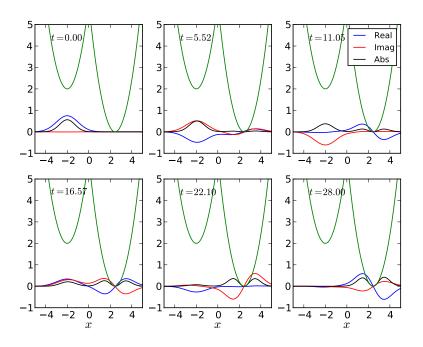
Nas figuras 3.14 e 3.15 visualizamos a evolução temporal da função de onda para ambos os sistemas, simétrico e assimétrico (U=2). Deste modo, reproduzimos os principais resultados obtidos para o tunelamento de 1ª ordem para o potencial harmônico duplo.

Figura 3.14 – Evolução temporal da função de onda para sistema de parábolas simétrico.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 3.15 — Evolução temporal da função de onda para sistema de parábolas com assimetria U=2.

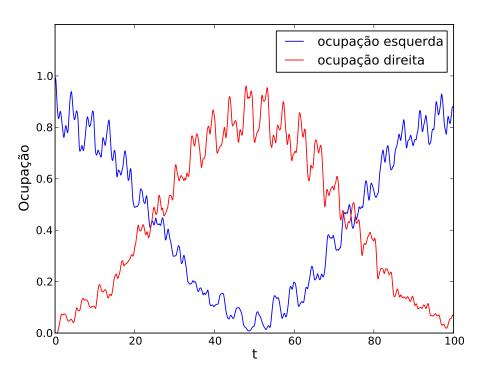


Fonte: Elaborada pelo autor

3.5.2 Transmissão coerente no poço duplo

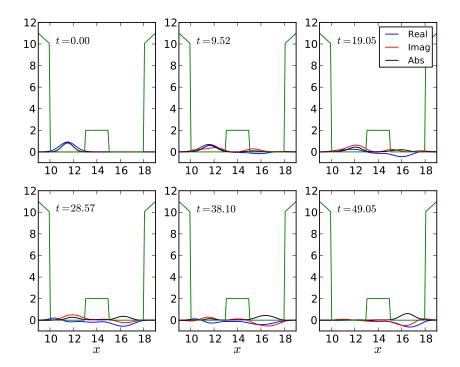
Por fim, tomemos o potencial de poço duplo com bordas confinantes (modificação da figura 3.4) tomando-se $V_0=V_1=2.0$, b=3.0, t=0.5 e d=0.5 (b é distância entre a parede externa da barreira (d+t) até a barreira infinita (d+t+b)). Colocamos uma partícula confinada em um dos poços (esquerdo no nosso caso) com condição inicial dado pela função gaussiana $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ que possui valor esperado de energia $E\approx1.0$ neste potencial, portanto abaixo da altura da barreira em questão. Assim, se a partícula passar para o outro poço, este movimento se dará através do tunelamento. Colocamos o sistema pra evoluir temporalmente e observamos que a função de onda é completamente transmitida da esquerda pra direita. Uma vez que o outro poço é completamente ocupado, a função começa a fazer o movimento contrário até atingir ocupação completa do poço à esquerda, esse processo se repete em um movimento oscilatório com frequência $\tau\approx49.05$. Obtivemos a ocupação dos poços esquerdo e direito. (fig. 3.16)

Figura 3.16 – Ocupação das regiões esquerda e direita como função do tempo para o potencial de barreira duplo sem região intermediária e barreiras confinantes nas bordas. Tempo de tunelamento $\tau \approx 49.05$. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0,\ t=0.5,\ d=0.5,\ V_0=2.0$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial.



Este tunelamento ocorre de maneira coerente, ou seja, o formato do módulo ao quadrado da função de onda ao atravessar a barreira permanece igual ao seu formato inicial, quando confinada à esquerda. Note que além da oscilação principal, oscilação da função de onda entre um poço e outro, existe uma oscilação secundária em torno da oscilação principal. Esta oscilação se deve ao fato da altura da barreira ter diminuído em comparação com a energia média da partícula, o que diminui o coeficiente de atenuação da barreira, fazendo com que seja mais difícil manter a função de onda confinada em um dos lados até que se complete um ciclo da oscilação principal. Através da fig. 3.17 conseguimos observar a evolução temporal da função de onda e ver que esta transmissão se dá de maneira coerente.

Figura 3.17 – Evolução temporal da função de onda no sistema de poço duplo quadrado visando observar a transmissão coerente. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: b=3.0, t=0.5, d=0.5, $V_0=2.0$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial.



3.6 Resultados principais

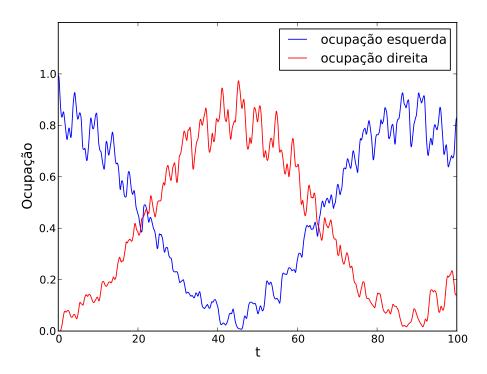
Nesta seção apresentamos os resultados relativos ao cotunelamento em sistemas com região intermediária confinante que, juntamente com a prova do critério da convergência do método de diferenças finitas da eq. de Schrödinger, constituem os principais resultados desta dissertação.

3.6.1 Cotunelamento e transmissão coerente no poço duplo com região intermediária

Agora retornamos ao nosso problema de interesse (poço duplo com região intermediária, ou seja, $V_0 < V_1$). Primeiramente vamos inspecionar os resultados obtidos para a simulação

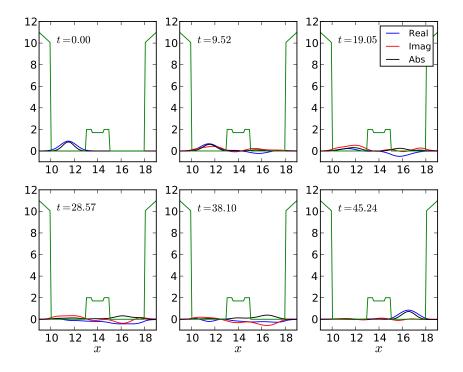
numérica da dinâmica de uma partícula, sob a perspectiva do cotunelamento. Considerando os parâmetros $V_0 = 1.7$, $V_1 = 2.0$, b = 3.0, t = 0.5 e d = 0.5 repetimos o procedimento da subseção 3.5.2, com a mesma condição inicial $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ de energia média $E \approx 1.0$ neste potencial. Colocamos o sistema pra evoluir temporalmente e vemos o mesmo movimento oscilatório anterior, mas desta vez com tempo de tunelamento au pprox45.24. Esta diminuição no tempo de tunelamento se deve ao fato de acrescentarmos a região intermediária: conforme diminuímos o valor de V_0 , tem-se a possibilidade de que mais estados (ligados) associados ao poço formado pela região intermediária estejam presentes. Como vimos na análise do coeficiente de transmissão, tais estados fazem o papel de canais entre as regiões esquerda e direita, servindo de ocupação virtual para a partícula no processo de transmissão via tunelamento. Como veremos, esta ocupação virtual é caracterizada através de teoria de perturbação independente do tempo, em que aproximamos os autoestados exatos por autoestados de sistemas isolados nas três regiões envolvidas (esquerda, meio e direita). Neste processo tem-se que os termos dominantes são os termos de segunda ordem, que possuem como estados intermediários virtuais os autoestados centrais (autoestados aproximados) com energia entre V_0 e V_1 . A fig. 3.18 mostra a ocupação dos poços esquerdo e direito como função do tempo.

Figura 3.18 – Ocupação das regiões esquerda e direita como função do tempo para o potencial de barreira duplo com região intermediária diferente de zero e barreiras confinantes nas bordas. Tempo de tunelamento $\tau \approx 45.24$. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: b=3.0, t=0.5, d=0.5, $V_0=1.7$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média iqual $E\approx 1.0$ neste potencial.



Novamente o tunelamento se dá de maneira coerente conforme indicado da evolução temporal do pacote de onda na fig. 3.19.

Figura 3.19 – Evolução temporal da função de onda no sistema de barreira duplo com região intermediária e barreiras confinantes nas bordas visando observar a transmissão coerente. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros para o sistema de barreiras: $b=3.0,\ t=0.5,\ d=0.5,\ V_0=1.7$ e $V_1=2.0$ (Olhar figura 3.4 o significado de cada um destes parâmetros). E como condição inicial utilizamos $\psi_0(x)=(2/\pi)^{1/4}e^{-(x-x_0)^2}$ como condição inicial, que possui energia média igual $E\approx 1.0$ neste potencial.



Estes resultados da dinâmica estão qualitativamente de pleno acordo com aqueles apresentados por Gentil e colaboradores (8), onde apresenta-se uma análise geral para potenciais confinantes da dinâmica do cotunelamento.

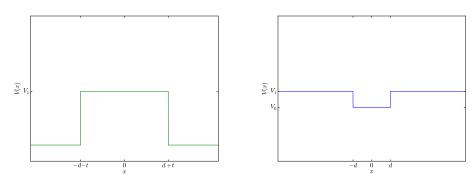
3.6.2 Processos de ocupação virtual e teoria de perturbação

Com os resultados obtidos para o coeficiente de transmissão (fig. 3.5) e os da dinâmica da ocupação dos poços (figs. 3.18 e 3.19), somos levados a considerar a possibilidade de que a dinâmica de tunelamento se dê como um processo de ocupação virtual para os valores de energia da partícula que não estejam em ressonância com os autoestados ligados do poço da região intermediária. A ocupação real ocorrerá, então, apenas para os valores de energia muito próximos das ressonâncias. Observe que tal conjectura é contra intuitiva, já que a região intermediária é acessível para uma partícula com energia $E \geqslant V_0$. Para

tentar verificar tal conjectura de maneira mais precisa, façamos o estudo das autofunções de dois potenciais limites:

- (i) O primeiro trata-se de uma barreira simples de altura V_1 e largura 2(d+t);
- (ii) O segundo será o caso definido por um poço de potencial dado por V_1 para todo |x|>d e V_0 para |x|< d.

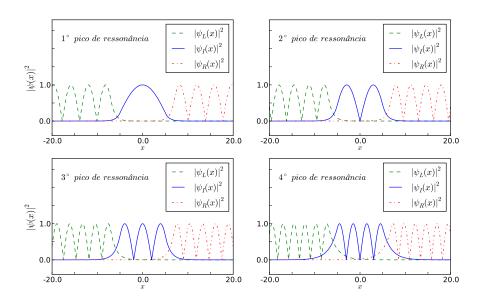
Figura 3.20 – Potenciais (i) e (ii) respectivamente



Fonte: Elaborada pelo autor

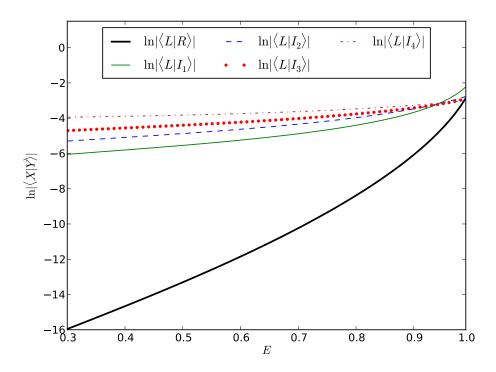
Para o potencial (i) as típicas funções para autoestados considerando incidência à esquerda já foram explicitamente discutidas na eq. 3.2 (existindo um conjunto análogo de funções para o caso de incidência à direita do potencial). Note que se a barreira for alta e larga o suficiente, tais funções ficam "localizadas" em seus respectivos lados do potencial (esquerda ou direita da barreira). A fig. 3.21 ilustra este caso para os valores de $V_0 = 0.3$, $V_1 = 1.0$, d = 5.0 e t = 2.0 usados para o cálculo do coeficiente de transmissão exato da fig. 3.24.

Figura 3.21 – Autofunções para os potenciais indicados em (i) e (ii). As autofunções $\psi_L(x)$ e $\psi_R(x)$ ($\psi_L(x) = \langle x|L(E)\rangle$ e $\psi_R(x) = \langle x|R(E)\rangle$) representam os autoestados do potencial indicado em (i), enquanto que as autofunções $\psi_{I_i}(x)$ (i=1,2,3,4) representam as quatro primeiras e únicas autofunções ligadas, localizadas entre V_0 e V_1 , do potencial indicado em (ii). Utilizamos $V_0=0.3,\ V_1=1.0,\ d=5.0$ e t=2.0 como parâmetros nos potenciais em questão. Essas autoenergias do potencial (ii) representam as energias de ressonância do potencial original. (sistema de barreira duplo com região intermediária)



Assim, se $|L(E)\rangle$ e $|R(E)\rangle$ representam tais estados localizados à esquerda e direita, tem-se que $|\langle L(E)|R(E)\rangle|\ll 1$ para todos os valores de $E< V_1$. De fato, como mostrado na fig. 3.22, existe um grande regime de valores de energia tal que tais estados podem ser considerados como ortogonais, $|\langle L(E)|R(E)\rangle|\approx 0$.

Figura 3.22 – Overlap entre as autofunções dos potenciais apresentados em (i) e (ii) como função da energia da autofunção à esquerda (ou direita). Parâmetros utilizados nos potenciais: $V_0 = 0.3, \ V_1 = 1.0, \ d = 5.0 \ \mathrm{e} \ t = 2.0$



Já para o potencial associado ao poço (ii), para valores de energia tais que $V_0 < E \leqslant V_1$, tem-se que seus autoestados de energia são discretos e representam estados localizados dentro do poço. Problemas de autovalores deste tipo são bem comuns e presentes em todos os livros texto de mecânica quântica. (3) Aqui iremos nos ater ao fato de que tais estados são localizados na região intermediária. Usaremos $V_0 = 0.3, V_1 = 1.0$ e d = 5.0 como parâmetros para o potencial apresentado em (ii) (iguais aos utilizados na obtenção da transmissão exata no poço de potencial duplo com região intermediária apresentado na fig. 3.22). Pode-se mostrar que 4 estados estão presentes no regime de interesse (fig. 3.21). Tais estados tem paridade definida e alternante. Observe que a sobreposição destes estados ligados e os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ também é pequena. Se chamarmos tais estados por $|I_i\rangle$ com i=1,2,3,4, tem-se que $|\langle L(E)|I_i\rangle|\ll 1$ e $\langle R(E)|I_i\rangle|\ll 1$. A figura 3.22 quantifica tal sobreposição. Deste modo, vemos que os estados $|L\rangle$, $|R\rangle$ e $|I_i\rangle$ são quase ortogonais entre si, de tal maneira que para os casos de interesse aqui, podemos considerar que tais estados formam, com boa aproximação, uma base para descrever os nossos estados físicos. Observe que tal aproximação começa a falhar à medida que tais estados deixam de ter

overlap negligenciável, o que ocorre para valores de energia próximos a altura máxima do potencial (ver fig. 3.22). Uma outra maneira de se ver esta falha na aproximação consiste em se perceber que à medida que a energia da partícula aumenta, tais autoestados deixam de ser "localizados", conseguindo penetrar cada vez mais nas outras regiões. Baseando-se nestas considerações, se tivermos uma partícula inicialmente localizada do lado esquerdo do potencial e esta tiver energia definida E, poderemos descrever seu estado inicial $\psi_0(x) \approx \psi_L(x) = \langle x | L(E) \rangle$. Deste modo, a amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula na região à direita do potencial deve ser dada como uma função do tempo por:

$$\langle R(E)|U(t,0)|L(E)\rangle, \tag{3.8}$$

onde U(t,0) é o operador evolução temporal do sistema. Observe que se a partícula for encontrada à direita do potencial, isto significa que ocorreu tunelamento na dinâmica, pois estamos considerando que $E < V_1$. Além disso, note que em tal processo a energia da partícula tem que se conservar, por isso a escolha do estado localizado à direita com a mesma energia. Como nosso potencial é constante,

$$U(t,0) = e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^n = 1 - \frac{iHt}{\hbar} - \frac{H^2 t^2}{2\hbar^2} + \dots,$$
 (3.9)

assim, a amplitude de probabilidade da eq. 3.8 adquire o seguinte formato,

$$\langle R(E)|U(t,0)|L(E)\rangle = \langle R|L\rangle - \langle R|H|L\rangle \frac{it}{\hbar} - \langle R|H^2|L\rangle \frac{t^2}{2\hbar^2} + \dots$$
 (3.10)

Mas, por hipótese, estamos considerando casos tais que $\langle R|L\rangle\approx 0$. Assim, verificamos que o processo de tunelamento passa a ter a forma:

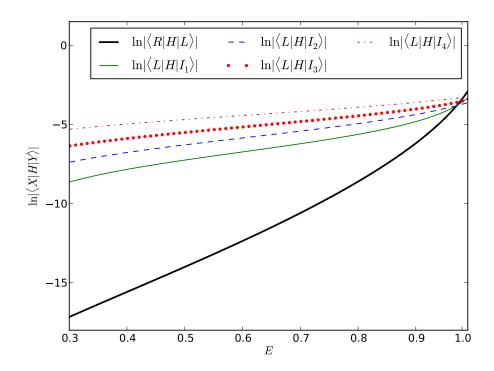
$$\langle R(E)|U(t,0)|L(E)\rangle \approx -\langle R|H|L\rangle \frac{it}{\hbar} - \sum_{n} \langle R|H|n\rangle \langle n|H|L\rangle \frac{t^2}{2\hbar^2} + \dots$$
 (3.11)

Note então que se $\langle R|H|L\rangle\approx 0$ (isto é, o hamiltoniano não acopla os estados $|L\rangle$ e $|R\rangle$), passamos a ter o processo de tunelamento dado por.

$$\langle R(E)|U(t,0)|L(E)\rangle \approx -\langle R|H|I\rangle\langle I|H|L\rangle \frac{t^2}{2\hbar^2}.$$
 (3.12)

Portanto, sob as condições $\langle R|L\rangle\approx 0$ e $\langle R|H|L\rangle\approx 0$ temos que o processo de tunelamento ocorre via processo virtual da ocupação da região intermediária (estados $|I_i\rangle$). Assim, fica claramente justificado o termo tunelamento de ordem superior (sendo o termo de 1^a ordem dado pelos termos diretos $\langle R|L\rangle$ e $\langle R|H|L\rangle$). Utilizando os mesmos parâmetros $V_0=0.3$, $V_1=1.0$, d=5.0 e t=2.0 para os potenciais (i) e (ii) os elementos de matriz $|\langle L|H|R\rangle|$ e $|\langle L|H|I_i\rangle|$ são apresentados na fig. 3.23.

Figura 3.23 – Elementos de matriz do Hamiltoniano do potencial original (potencial duplo comregião intermediária) na base de autofunções dos potenciais apresentados em (i) e (ii) $(\{|L\rangle, \{|I\rangle, \{|R\rangle\})$ como função da energia da autofunção à esquerda (ou direita). Parâmetros utilizados nos potenciais: $V_0 = 0.3$, $V_1 = 1.0$, d = 5.0 e t = 2.0



Fonte: Elaborada pelo autor

Perceba que para baixos valores de energia os coeficientes diferem de várias ordens de magnitude.

Deste modo, com esta modelagem verificamos quais as condições necessárias para que a física do cotunelamento passe a desempenhar papel crucial na dinâmica do tunelamento de uma partícula cujo potencial apresenta uma região intermediária de confinamento.

3.6.3 Cálculo do coeficiente de transmissão

Finalmente, como último resultado obtido nesta dissertação, sob as condições já discutidas $\langle R|L\rangle\approx 0$ e $\langle R|H|L\rangle\approx 0$, podemos calcular o coeficiente de transmissão olhando para as autofunções do bloco matricial do hamiltoniano na representação dos estados $\{|L(E)\rangle, |I\rangle, |R(E)\rangle\}$,

$$\begin{pmatrix} \langle L|H|L \rangle & \langle L|H|I \rangle & \langle L|H|R \rangle \\ \langle I|H|L \rangle & \langle I|H|I \rangle & \langle I|H|L \rangle \\ \langle R|H|L \rangle & \langle R|H|I \rangle & \langle R|H|R \rangle \end{pmatrix}, \tag{3.13}$$

se $\langle L|H|R
anglepprox 0$,

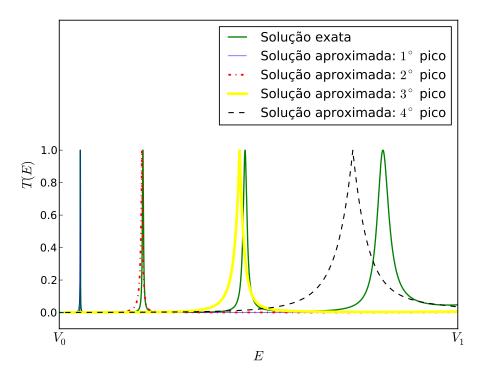
$$\begin{pmatrix}
\langle L|H|L\rangle & \langle L|H|I\rangle & 0 \\
\langle I|H|L\rangle & \langle I|H|I\rangle & \langle I|H|L\rangle \\
0 & \langle R|H|I\rangle & \langle R|H|R\rangle
\end{pmatrix}.$$
(3.14)

Note que se o coeficiente de transmissão for zero, os autoestados desse bloco matricial devem ser os estados localizados $\{|L\rangle, |I\rangle, |R\rangle\}$ (o potencial não permite o tunelamento). Já para o caso de transmissão 1, deve haver um autoestado completamente deslocalizado, i.e.,

$$|\phi\rangle = \alpha |L\rangle + \beta |I\rangle + \gamma |R\rangle,$$
 (3.15)

tal que $\alpha = \beta = \gamma = 1/\sqrt{3}$. Assim, se olharmos para a razão $|\beta/\alpha|$ e $|\gamma/\beta|$ teremos uma estimativa do coeficiente de transmissão. De fato, como revela a figura 3.24 a estimativa do coeficiente de transmissão calculado através desta modelagem é bastante precisa no regime de validade do modelo de ocupação virtual (energias muito menores do que V_1).

Figura 3.24 – Comparação do coeficiente de transmissão aproximado com o exato no sistema de barreira dupla com região intermediária. Parâmetros do potencial: $V_0=0.3,\ V_1=1.0,\ d=5.0$ e t=2.0



Perceba que o cálculo do coeficiente de transmissão pode ser melhorado se ao invés de considerarmos apenas um bloco contendo um único estado localizado, passássemos a considerar a presença dos demais níveis.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÃO

Neste trabalho fizemos um estudo da física do tunelamento de uma partícula na presença de potenciais unidimensionais constantes. Através de um estudo de caso (potencial de barreira dupla com região intermediária confinante) verificamos a existência de um processo que ocorre através da ocupação virtual da região confinante. Observando os resultados exatos obtidos para o coeficiente de transmissão (analítico) e para a dinâmica do sistema (numérico), fomos levados a considerar uma modelagem perturbativa em termos de estados "quase-localizados" em cada região do problema. Esta descrição nos permitiu determinar explicitamente as condições necessárias para que o tunelamento de ordens superiores (cotunelamento) torne-se apreciável. Ao estudar o caso de potenciais não confinantes, o nosso trabalho expande a compreensão de que tal fenômeno não está restrito apenas a sistemas confinados. (8)

Outro ponto importante desta dissertação foi a confirmação através de prova analítica de que o passo crítico $\Delta t_{crítico}^{'}$ também gera soluções estáveis e fisicamente válidas da equação de Schrödinger através do método de diferenças finitas FDTD. Até então, somente verificações computacionais mostravam que tal passo ($\Delta t_{crítico}^{'}$) fornecia resultados convergentes, não tendo prova analítica deste fato.

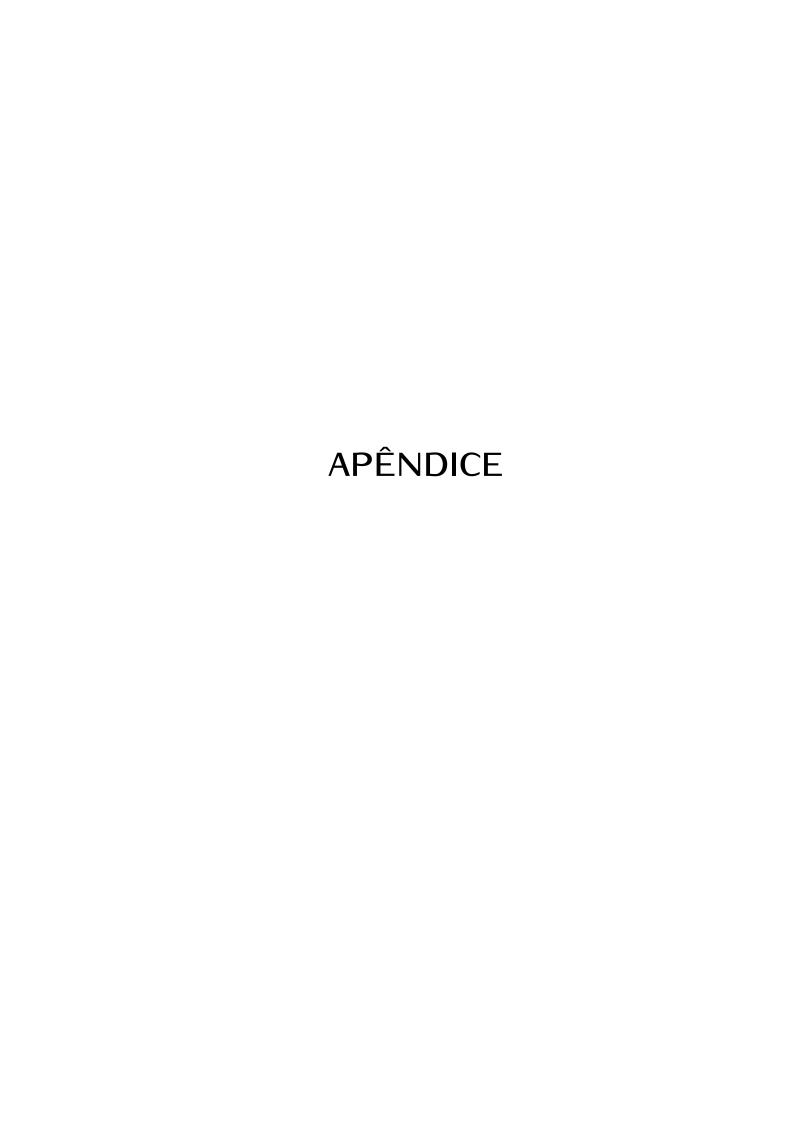
Por fim, esperamos que a modelagem via teoria de perturbação possa ajudar a entender o fenômeno de transporte em sistemas similares ao estudado neste trabalho, de tal maneira que a sua aplicação a problemas reais possa vir a constituir uma boa perspectiva para futuras investigações.

REFERÊNCIAS

- 1 RAZAVY, M. Quantum theory of tunneling. Singapore: World Scientific, 2003.
- 2 GAMOW, G. On the quantum theory of tunneling. *Zeitschrift Fur Physik*, v. 51, n. 3-4, p. 204-212, 1928.
- 3 EISBERG, R.; RESNICK, R. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles.* New York: John Wiley Sons, 1985.
- 4 GRABERT, H.; DEVORET, M. H. *Single charge tunneling:* Coulomb blockade phenomena in nanostructures. New York: Springer, 1992.
- 5 ALTSHULER, B. L.; LEE, P. A.; WEBB, R. A. *Mesoscopic phenomena in solids*. Amsterdam: Elsevier, 1991.
- 6 TINKHAM, M. Introduction to superconductivity. New York: McGraw-Hill, 1996.
- 7 MERZBACHER, E. *Quantum mechanics*. New York: John Wiley Sons, 1997.
- 8 MORAES NETO, G. D.; PONTE, M. A.; MOUSSA, M. H. Y. Nonlocal dissipative tunneling for high-fidelity quantum-state transfer between distant parties. *Physical Review A*, v. 85, n. 5, p. 052303(1-5), 2012.
- 9 SORIANO, A.; NAVARRO E. A.; PORTÍ J. A.; SUCH V. Analysis of the finite difference time domain technique to solve the Schrodinger equation for quantum devices. *Journal of Applied Physics*, v. 95, n. 12, p. 8011–8018, 2004.
- 10 DAI, W.; LI, G.; NASSAR, R.; SU, S. Analysis of the finite difference time domain technique to solve the Schrodinger equation for quantum devices. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, v. 21, n. 6, p. 1140–1154, 2005.
- 11 LAFARGE, P.; ESTEVE D. Nondivergent calculation of unwanted high-order tunneling rates in single-electron devices. *Physical Review B*, v. 48, n. 19, p. 14309-14318, 1993.
- 12 SAKURAI, J. J. Modern quantum mechanics. United States: Addison Wesley, 1993.

70 REFERÊNCIAS

13 MARTIN NIETO, M.; GUTSCHICK, V. P.; BENDER, C. M.; COOPER F.; STROTT-MAN D. Resonances in quantum mechanical tunneling. *Physics Letters*, v. 163, n. 5-6, p. 336-342, 1985.



APÊNDICE A

NÚCLEO DO PROGRAMA UTILIZADO PARA SIMULAR A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Este apêndice contém a principal parte do programa utilizado nesta dissertação, a parte que resolve a equação de Schrödinger para os potenciais em questão.

```
Vmax = V.max() #Maior valor do dominio no dominio
dt
    = 1./(2./dx**2 + Vmax/2.) #Passo temporal critico
c 1
   = dt/dx**2 #Constante 1
                #Constante 2
c2 = dt
c2V = c2*V
psi_r = np.zeros((2,N)) #Parte real da funcao de onda
psi_i = np.zeros((2,N)) #Parte imaginaria da funcao de onda
psi_r[PR] = Parte real da condicao inicial
psi_i[PR] = Parte imaginaria da condicao inicial
PR = 0 #Presente
FU = 1 #Futuro
IDX1 = range(1, N-1) #psi [k] - posicao central
IDX2 = range(2,N) #psi [ k + 1 ] - posicao a direita
IDX3 = range(0, N-2) #psi [ k - 1 ] - posicao a esquerda
```

```
#Loop temporal para calcular a evolucao da funcao de onda
for t in range(T+1):
   #APLICANDO AS EQUACOES DE UPDATE
   #Obtendo o futuro da parte imaginaria da funcao de onda
   psi_i[FU,IDX1] = psi_i[PR,IDX1] + c1*(psi_r[PR,IDX2] - 2*psi_r[
      PR, IDX1] + psi_r[PR, IDX3])
   psi_i[FU] -= c2V*psi_r[PR]
   #Obtendo o futuro da parte real da funcao de onda
   #------
   psi_r[FU,IDX1] = psi_r[PR,IDX1] - c1*(psi_i[FU,IDX2] - 2*psi_i[
      FU,IDX1] + psi_i[FU,IDX3])
   psi_r[FU] += c2V*psi_i[FU]
   #Passando a expressoes da funcao de onda do futuro para o
      presente
   psi_r[PR] = psi_r[FU]
   psi_i[PR] = psi_i[FU]
```