

# Poço Quântico Duplo: 1-Elétron, 2-Poços

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 30 de março de 2020

## Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>O perfil do potencial</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>As características da função de onda</b>	<b>3</b>
<b>4</b>	<b>A equação da energia</b>	<b>5</b>
<b>5</b>	<b><math>P/Q</math> (função par)</b>	<b>7</b>
<b>6</b>	<b><math>\bar{P}/\bar{Q}</math> (função ímpar)</b>	<b>8</b>
<b>7</b>	<b>Determinação da energia de confinamento</b>	<b>9</b>
7.1	Exemplo numérico . . . . .	10
<b>8</b>	<b>O efeito da espessura da barreira</b>	<b>12</b>
<b>9</b>	<b>A função de onda par</b>	<b>14</b>
<b>10</b>	<b>A função de onda ímpar</b>	<b>15</b>
<b>11</b>	<b>A função de onda normalizada</b>	<b>16</b>
<b>12</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>18</b>

# 1 Introdução

O artigo 2-Massas, 2-Poços; 2-Massas, 1-Poço; 2-Elétrons, 2-Poços; 2-Elétrons, 1-Poço analisa 4 situações de 2-partículas confinadas em poços quânticos.

Este artigo analisa a situação de 1-elétron confinado em 2-poços quânticos. Na literatura, o sistema é conhecido como *Double Quantum Well* (DQW) — Poço Quântico Duplo. A estrutura é formada por 2-poços separados por 1-barreira delgada, o que permite o tunelamento do elétron através da barreira (Tetsuya Tada, 1988). Isso significa que há probabilidade do elétron ser encontrado no primeiro e também no segundo poço do DQW.

Um método – para se determinar a energia de confinamento e a função de onda de um DQW – é o método numérico (A. Keshavarz, 2010).

Neste artigo – a energia de confinamento e a função de onda – serão encontradas com base em resultados de equações transcendentais (Tsuneo Kamizato, 1989). A técnica consiste em *cruzar equações* que levam em conta condições de continuidade da função de onda nas interfaces poço/barreira — o local do cruzamento pode ser determinado por meio de um gráfico.

## 2 O perfil do potencial

O poço quântico duplo (DQW) é formado por 2-poços retangulares separados por 1-barreira central. Neste artigo, os poços serão considerados com potencial negativo,  $V(x) = -V_0$ , e as barreiras laterais e central, com potencial igual a zero,  $V(x) = 0$ . A Fig. 1 mostra o perfil de potencial e a nomenclatura adotada para designar cada peça do DQW.

Olhando os cortes da Fig. 1, nota-se que  $(b, w)$  representam a largura de barreira central e largura de poço individual, respectivamente. Também, que há simetria em relação à origem das posições ( $x = 0$ ). Por isso, esse tipo de DQW é classificado como simétrico – é classificado como assimétrico quando os poços são diferentes, por exemplo, caso não possuam larguras ou profundidades iguais (J. Ram, 2006).

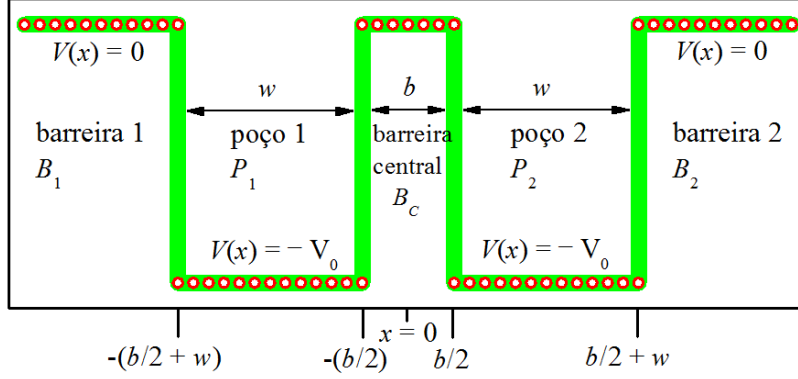


Figura 1: Perfil de potencial do poço quântico duplo e nomenclatura das peças.

### 3 As características da função de onda

O estudo se concentrará na energia de partícula *menor* que a altura de barreira e *maior* que o fundo de poço, ou seja, quando a energia do elétron estiver entre  $-V_0 < E < 0$ .

Na região dos poços, o número de onda da peça de função de onda é real:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}, \quad (1)$$

e a solução da equação de Schrödinger resulta em exponencial complexa, do tipo  $e^{\pm ikx}$ .

Na região das barreiras (central, barreira-1 e barreira-2), a combinação de potencial nulo com energia de partícula negativa produz número de onda imaginário:

$$k^{\text{img}} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - 0)}, \quad (2)$$

sendo conveniente escrevê-lo na forma

$$k^{\text{img}} = iq, \quad (3)$$

onde

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(0 - E)}. \quad (4)$$

Então, na região das barreiras, a solução da equação de Schrödinger resulta em exponencial real, do tipo  $e^{\pm qx}$ .

Em (1) e (4), as grandezas  $m$  e  $\hbar$  representam a massa do elétron e a constante de Planck, nesta ordem.

Explorar a simetria do DQW 1 poupa trabalho na hora de determinar a função de onda global, que se estende de  $-\infty < x < \infty$ , pois, é preciso se preocupar apenas com a determinação da função do lado direito do DQW, já que a função do lado esquerdo ( $x < 0$ ) é mais ou menos igual à função do lado direito ( $x > 0$ ):

$$\Psi(x < 0) = \pm \Psi(x > 0). \quad (5)$$

Na linguagem matemática, quando

$$\Psi(x < 0) = +\Psi(x > 0), \quad (6)$$

diz-se que a função é par (seu gráfico tem simetria em relação ao eixo vertical), e quando

$$\Psi(x < 0) = -\Psi(x > 0), \quad (7)$$

é dito que a função é ímpar (seu gráfico tem simetria em relação à origem).

Logo, as soluções do DQW 1 se dividem em 2-grupos: o conjunto de funções de onda pares e o conjunto de funções de onda ímpares.

Deve-se escolher peças de função de onda com o objetivo de simplificar a manipulação matemática. O capítulo 9 do livro *Mecânica Quântica: Confinamento e Espalhamento por Potenciais Retangulares*, que trata do poço quântico simples, iniciou a análise utilizando peças complexas, todavia, após alguns passos matemáticos, transformou-se as peças complexas em peças reais (senos e cossenos). Neste artigo, vamos prontamente iniciar o estudo considerando soluções reais.

Qual solução poderá compor as peças dos poços?

Há propagação de ondas dentro dos poços, ondas que incidem e refletem na interface poço/barreira, então, poderia-se operar com uma combinação de exponenciais complexas, todavia, é mais conveniente usar uma combinação de seno e cosseno.

Qual solução poderá compor a peça da barreira central?

Não há propagação de ondas na barreira central, a solução é a soma de duas exponenciais reais: as que fariam a vez da “onda incidente” e da “onda refletida” – aqui cabe lembrar que a combinação de exponenciais reais resulta em cosseno hiperbólico ou seno hiperbólico.

Qual solução poderá compor as peças das barreiras laterais?

Também não há propagação de ondas nas barreiras laterais, a solução poderia ser do mesmo tipo da barreira central, a soma de duas exponenciais reais, todavia, as barreiras laterais se estendem até o infinito, por isso, a única exponencial que deve permanecer na solução, é aquela que tende a zero no infinito.

## 4 A equação da energia

Esta seção apresenta o procedimento que leva à equação capaz de fornecer os valores da energia de confinamento do elétron, uma equação cujas raízes podem ser determinadas com auxílio gráfico, denominada equação transcendental.

A notação que é utilizada para descrever as peças da função de onda global, está impressa na Fig. 1.

As ponderações feitas na seção [3] nos leva a concentrar o trabalho ao redor do poço-2.

Com o intuito de utilizar o padrão Latex, será utilizado **sin** para seno, **cos** para cosseno, **tan** para tangente, **exp** para exponencial, **cosh** para cosseno hiperbólico e **sinh** para seno hiperbólico.

A função de onda dentro do poço-2 é escrita como combinação de seno e cosseno:

$$P_2(x) = P \cos[kx] + Q \sin[kx], \quad (8)$$

onde  $P$  e  $Q$  são amplitudes e  $k$  é o número de onda (1).

A função de onda dentro da barreira-2 tem a forma de uma exponencial que decai em função do número de onda (4):

$$B_2(x) = D \exp[-qx]. \quad (9)$$

A função de onda deve ser contínua na interface poço/barreira, para isso, iguala-se (8) com (9) no ponto  $x = b/2 + w$ :

$$P \cos[k(b/2 + w)] + Q \sin[k(b/2 + w)] = D \exp[-q(b/2 + w)]. \quad (10)$$

A derivada da função de onda também deve ser contínua na interface poço/barreira, para isso, deriva-se as Eqs. (8) e (9)

$$\begin{aligned} P'_2(x) &= -kP \sin[kx] + kQ \cos[kx], \\ B'_2(x) &= -qD \exp[-qx], \end{aligned} \quad (11)$$

e, depois, iguala-se os resultados das derivadas no ponto  $x = b/2 + w$ :

$$-P \sin[k(b/2 + w)] + Q \cos[k(b/2 + w)] = -\frac{q}{k} D \exp[-q(b/2 + w)]. \quad (12)$$

Divide-se a Eq. (12) pela Eq. (10):

$$\frac{-P \sin[k(b/2 + w)] + Q \cos[k(b/2 + w)]}{P \cos[k(b/2 + w)] + Q \sin[k(b/2 + w)]} = -\frac{q}{k}. \quad (13)$$

Manipula-se a Eq. (13) até chegar no agrupamento dos senos e os cossenos:

$$-Q \sin[k(b/2 + w)] \left[ 1 - \frac{kP}{qQ} \right] = P \cos[k(b/2 + w)] \left[ 1 + \frac{kQ}{qP} \right]. \quad (14)$$

Encerra-se a dedução utilizando a definição de tangente:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(P/Q) \frac{[1 + (k/q)(Q/P)]}{[1 - (k/q)(P/Q)]}. \quad (15)$$

Que informação se torna pública por meio da equação transcendental (15)?

Disparando o gráfico da Eq. (15), a energia de confinamento é determinada fixando atenção no cruzamento que a curva tangente faz com a curva da expressão do lado direito.

Das variáveis da Eq. (15), ainda resta saber a expressão de  $P/Q$ . Conforme discutido na seção [3], há uma expressão vinculada ao conjunto de funções de onda pares e outra vinculada ao conjunto de funções de onda ímpares.

## 5 $P/Q$ (função par)

Esta seção determina a expressão de  $P/Q$ , vinculada à função de onda par. Para isso, analisa a continuidade da função de onda na interface poço-2/barreira-central: ponto  $x = b/2$ .

A função de onda dentro da barreira-central é descrita por um cosseno hiperbólico, já que cossenos hiperbólicos são funções pares:

$$B_c(x) = B \cosh[qx]. \quad (16)$$

A derivada do cosseno hiperbólico resulta em seno hiperbólico

$$B'_c(x) = qB \sinh[qx]. \quad (17)$$

A função de onda deve ser contínua na interface poço/barreira, para isso, iguala-se (8) com (16) no ponto  $x = b/2$ :

$$P \cos[k(b/2)] + Q \sin[k(b/2)] = B \cosh[q(b/2)]. \quad (18)$$

A derivada da função de onda também deve ser contínua na interface poço/barreira, para isso, no ponto  $x = b/2$ , iguala-se  $P'_2(x)$  de (11) com  $B'_c(x)$  de (17):

$$P \sin[k(b/2)] - Q \cos[k(b/2)] = -\frac{q}{k} B \sinh[q(b/2)]. \quad (19)$$

Multiplicação da Eq. (18) por  $\cos[k(b/2)]$ :

$$P \cos^2[k(b/2)] + Q \sin[k(b/2)] \cos[k(b/2)] = B \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]. \quad (20)$$

Multiplicação da Eq. (19) por  $\sin[k(b/2)]$ :

$$P \sin^2[k(b/2)] - Q \cos[k(b/2)] \sin[k(b/2)] = -\frac{q}{k} B \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]. \quad (21)$$

Lembrando que  $\cos^2 + \sin^2 = 1$ , soma das Eqs. (20) e (21):

$$P = B \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \frac{q}{k} B \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]. \quad (22)$$

Agora, multiplicação da Eq. (18) por  $\sin[k(b/2)]$ , multiplicação da Eq. (19) por  $\cos[k(b/2)]$ , e soma dos resultados:

$$Q = B \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \frac{q}{k} B \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]. \quad (23)$$

Por fim, a divisão de (22) por (23), resulta na expressão de  $P/Q$  (função par):

$$P/Q = \frac{(k/q) \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{(k/q) \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (24)$$

## 6 $\bar{P}/\bar{Q}$ (função ímpar)

Esta seção segue o procedimento da seção [5] — com algumas adaptações.

A função de onda de caráter *ímpar* será marcada com uma *barra*.



A função de onda dentro da barreira-central, agora, é ímpar, por isso, é representada por um seno hiperbólico, já que senos hiperbólicos são funções ímpares:

$$\begin{aligned}\bar{B}_c(x) &= \bar{B} \sinh[qx], \\ \bar{B}'_c(x) &= q\bar{B} \cosh[qx].\end{aligned}\tag{25}$$

A função de onda dentro do poço-2 *continua* escrita como combinação de seno e cosseno:

$$\begin{aligned}\bar{P}_2(x) &= \bar{P} \cos[kx] + \bar{Q} \sin[kx], \\ \bar{P}'_2(x) &= -k\bar{P} \sin[kx] + k\bar{Q} \cos[kx].\end{aligned}\tag{26}$$

Semelhante ao que fizemos na seção anterior, é hora de aplicar as condições de continuidade no ponto  $x = b/2$  e manipular os resultados. Com um pouco de trabalho, é fácil mostrar que  $\bar{P}/\bar{Q}$  (função ímpar) tem o aspecto:

$$\bar{P}/\bar{Q} = \frac{(k/q) \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{(k/q) \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}.\tag{27}$$

## 7 Determinação da energia de confinamento

A determinação da energia de confinamento do elétron no poço quântico duplo, lança mão da equação transcendental desenvolvida na seção [4] e das expressões deduzidas nas seções [5] e [6]. Vamos, então, agrupá-las nesta seção.

Ao trabalhar com **função de onda par**, deve-se usar:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(P/Q) \frac{[1 + (k/q)(Q/P)]}{[1 - (k/q)(P/Q)]},\tag{28}$$

$$P/Q = \frac{(k/q) \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{(k/q) \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}.\tag{29}$$

E, com **função de onda ímpar**:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(\bar{P}/\bar{Q}) \frac{[1 + (k/q)\bar{Q}/\bar{P}]}{[1 - (k/q)\bar{P}/\bar{Q}]}, \quad (30)$$

$$\bar{P}/\bar{Q} = \frac{(k/q) \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{(k/q) \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (31)$$

O método requer varredura na energia do elétron, que é negativa, e está embutida nos números de onda:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}, \quad (32)$$

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(0 - E)}. \quad (33)$$

Como se vê na Fig. 1, para fitar toda série de energia de confinamento, a varredura deve conter os valores:  $-V_0 < E < 0$ . Ao invés da inspeção ser realizada com números negativos, é preferível utilizar valores positivos. Para isso, pode-se parametrizar a energia:

$$E = (\eta - 1)V_0, \quad (34)$$

e fazer o parâmetro de energia percorrer os valores:  $0 < \eta < 1$ .

## 7.1 Exemplo numérico

Vamos colocar números nas fórmulas!

Este exemplo considera um DQW de profundidade  $V_0 = 0,1$  eV e estrutura 100-20-100 Å, quer dizer, de  $w = 100$  Å e  $b = 20$  Å. As curvas das Eqs. (28) e (30), que foram designadas **curva par** e **curva ímpar**, respectivamente, são apresentadas na Fig. 2.

Os cruzamentos das equações transcendentais revelam os seguintes parâmetros de energia (adimensionais):

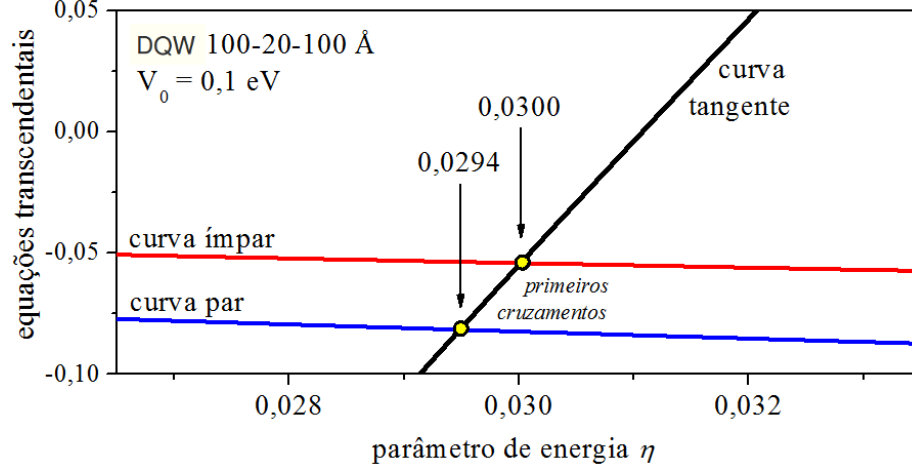


Figura 2: Cruzamentos de equações transcendentais.

$$\begin{aligned}\eta_1 &= 0,0294 \quad \leftarrow \text{curva par}, \\ \eta_2 &= 0,0300 \quad \leftarrow \text{curva ímpar}.\end{aligned}\tag{35}$$

Os parâmetros (35) correspondem às seguintes energias de confinamento (meV):

$$\begin{aligned}E_1 &= -97,06; \\ E_2 &= -97,00.\end{aligned}\tag{36}$$

O nível de energia é definido como:

$$\epsilon = E + V_0.\tag{37}$$

Já que  $V_0 = 100$  meV, as energias (36) correspondem aos seguintes níveis de energia (meV):

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= 2,94; \\ \epsilon_2 &= 3,00.\end{aligned}\tag{38}$$

Os resultados indicam que o nível de energia do estado fundamental se origina da solução par e que o nível de energia do primeiro estado excitado vem da solução ímpar. A diferença de energia entre os níveis de energia (38) é (meV):

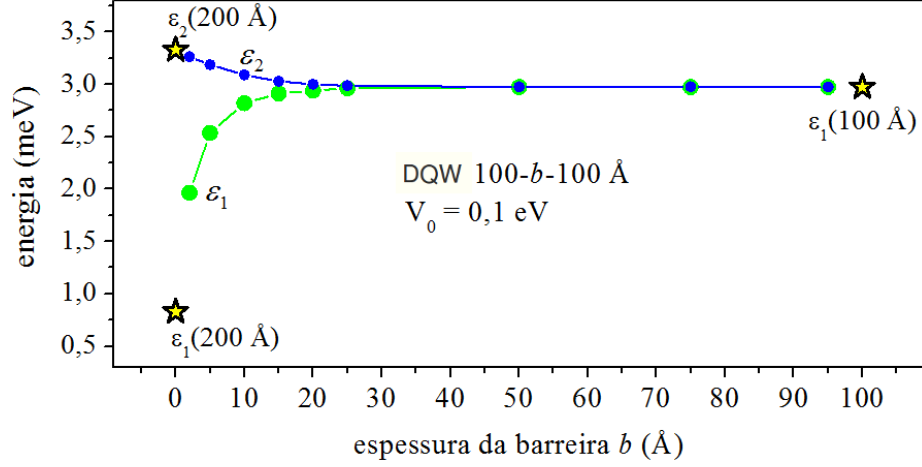


Figura 3: Efeito de espessura de barreira. A geometria e profundidade do DQW estão na própria figura.

$$\epsilon_2 - \epsilon_1 = 0,06. \quad (39)$$

## 8 O efeito da espessura da barreira

A energia de confinamento é sensível em relação à espessura da barreira-central, ao valor de  $b$ . A função de onda do lado esquerdo do DQW se conecta com a do lado direito, através da barreira-central, mas, se os poços estiverem muito afastados um do outro, a função de onda perde a conexão. Nesse caso, o efeito de tunelamento passa a ser desprezível, e o DQW se comporta como 2-poços simples, individuais. Por exemplo, para o DQW da seção [7.1], o efeito de espessura de barreira sobre os níveis de energia é apresentado na Fig. 3.

O aumento da espessura da barreira faz os níveis do DQW ( $\epsilon_1, \epsilon_2$ ) se aproximarem do patamar  $\epsilon_1$  (100 Å): nível de energia do estado fundamental de um poço simples de largura 100 Å. O efeito do desacoplamento dos poços é nítido, por exemplo, quando a barreira atinge 50 Å de espessura. Nesse caso, o poço duplo (100-50-100 Å) se comporta como um poço simples (100 Å) afastado (e desacoplado) de outro poço simples (100 Å).

Por outro lado, barreiras delgadas (finas) intensificam a diferença entre os níveis

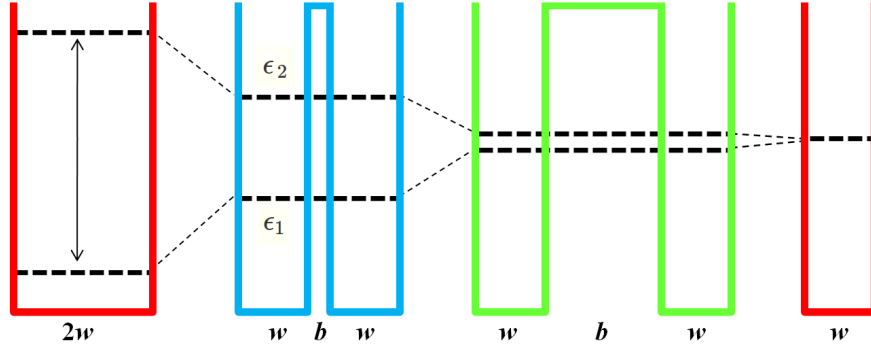


Figura 4: Ilustração do efeito de espessura de barreira.

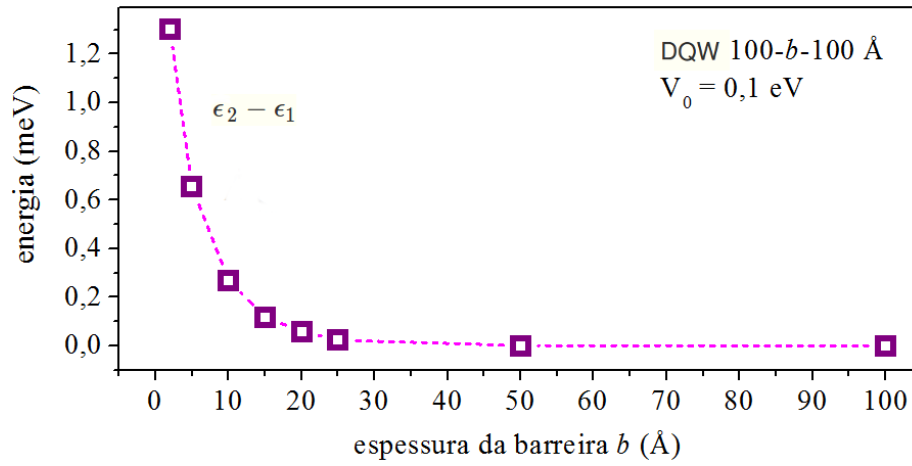


Figura 5: Comportamento da diferença de energia entre níveis de energia. A geometria e profundidade do DQW estão na própria figura.

do DQW, como se vê, no início da Fig. 3. No limite da barreira desaparecer ( $b \rightarrow 0$ ), o DQW se comporta como um poço simples de largura  $2w$ : O nível de energia  $\epsilon_1$  tende ao nível de energia do estado fundamental de um poço simples de largura  $200 \text{ \AA}$ , e o nível de energia  $\epsilon_2$ , avizinha-se do nível de energia do primeiro estado excitado desse mesmo poço simples.

O efeito de espessura de barreira é ilustrado na Fig. 4

A Fig. 5 mostra que a diferença de energia entre os níveis de energia ( $\epsilon_2 - \epsilon_1$ ) do DQW da seção [7.1] cai exponencialmente em função da largura da barreira.

## 9 A função de onda par

Distribuído pelas seções, há peças para a construção da função de onda de caráter par, que se estende de  $-\infty < x < \infty$ . Cabe, agora, organizar essas peças.

Antes de tudo, precisamos revestir a notação com o fato da energia ser quantizada. Faremos isso, adicionando  $n$  à notação:

$$\begin{aligned} k_n &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)}, \\ q_n &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(0 - E_n)}, \end{aligned} \quad (40)$$

Nesta seção, o rótulo  $n$  corre entre os números ímpares:  $n = 1, 3, 5, \dots$

O procedimento é bem simples: Para encontrar a função de onda do lado direito do DQW, divide-se as Eqs. (8), (9) e (16) pela quantidade  $Q$ :

$$\begin{aligned} P_2(x)/Q &= (P/Q) \cos[k_n x] + \sin[k_n x], \\ B_2(x)/Q &= (D/Q) \exp[-q_n x], \\ B_c(x)/Q &= (B/Q) \cosh[q_n x], \end{aligned} \quad (41)$$

sendo as relações de apoio:

$$\begin{aligned} P/Q &= \frac{(k_n/q_n) \cosh[q_n(b/2)] \cos[k_n(b/2)] - \sinh[q_n(b/2)] \sin[k_n(b/2)]}{(k_n/q_n) \cosh[q_n(b/2)] \sin[k_n(b/2)] + \sinh[q_n(b/2)] \cos[k_n(b/2)]}, \\ D/Q &= \{(P/Q) \cos[k_n(b/2 + w)] + \sin[k_n(b/2 + w)]\} \exp[q_n(b/2 + w)], \\ B/Q &= \frac{(P/Q) \cos[k_n(b/2)] + \sin[k_n(b/2)]}{\cosh[q_n(b/2)]}. \end{aligned} \quad (42)$$

Agora, o lado esquerdo é o lado negativo ( $x < 0$ ). Vamos chamar os negativos de  $x_-$  (e os positivos de  $x_+$ ). Então, para encontrar a função de onda do lado esquerdo do DQW, explora-se o fato deste caso de trabalho ser o *caso par* e, conforme (6), a função do lado esquerdo é *igual* à função do lado direito, logo:

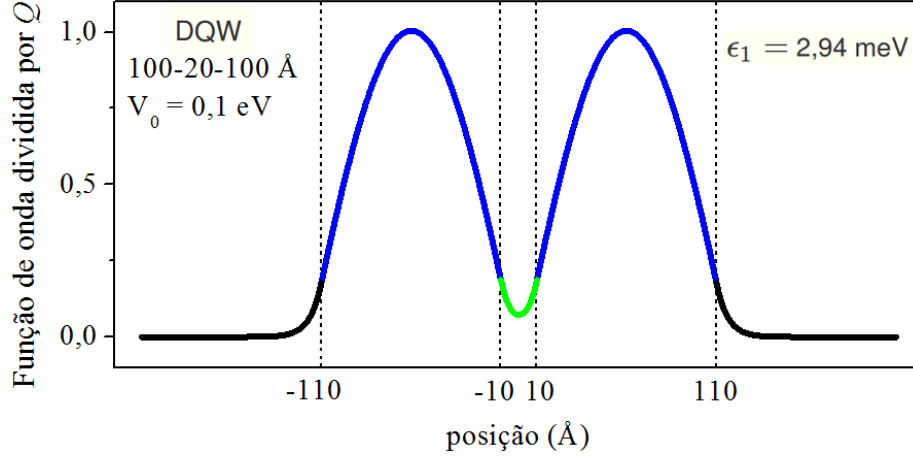


Figura 6: Função de onda do estado fundamental. A geometria e profundidade do DQW estão na própria figura.

$$\begin{aligned}
 P_1(x_-)/Q &= P_2(x_+)/Q, \\
 B_1(x_-)/Q &= B_2(x_+)/Q, \\
 B_c(x_-)/Q &= B_c(x_+)/Q.
 \end{aligned}
 \tag{43}$$

Por exemplo:

$$B_1(-121)/Q = (D/Q) \exp[-q_n \cdot 121]. \tag{44}$$

As peças (41) e (43) constroem a função de onda par em toda extensão do DQW. Mantendo a geometria e profundidade do DQW da seção [7.1], a Fig. 6 apresenta a função de onda do estado fundamental — nível de energia  $\epsilon_1 = 2,94$  meV.

## 10 A função de onda ímpar

Deve-se lembrar que a notação do caso *ímpar* é marcada com uma *barra*. Também, que as posições do lado esquerdo e direito são representadas por  $x_-$  e  $x_+$ , respectivamente.

Atenção na hora de utilizar os números de onda (40): Nesta seção, o rótulo  $n$  corre entre os números pares:  $n = 2, 4, 6, \dots$

Do lado direito do DQW:

$$\begin{aligned}\bar{P}_2(x)/\bar{Q} &= (\bar{P}/\bar{Q}) \cos[k_n x] + \sin[k_n x], \\ \bar{B}_2(x)/\bar{Q} &= (\bar{D}/\bar{Q}) \exp[-q_n x], \\ \bar{B}_c(x)/\bar{Q} &= (\bar{B}/\bar{Q}) \sinh[q_n x].\end{aligned}\tag{45}$$

Agora, as relações de apoio são:

$$\begin{aligned}\bar{P}/\bar{Q} &= \frac{(k_n/q_n) \sinh[q_n(b/2)] \cos[k_n(b/2)] - \cosh[q_n(b/2)] \sin[k_n(b/2)]}{(k_n/q_n) \sinh[q_n(b/2)] \sin[k_n(b/2)] + \cosh[q_n(b/2)] \cos[k_n(b/2)]}, \\ \bar{D}/\bar{Q} &= \left\{ (\bar{P}/\bar{Q}) \cos[k_n(b/2 + w)] + \sin[k_n(b/2 + w)] \right\} \exp[q_n(b/2 + w)], \\ \bar{B}/\bar{Q} &= \frac{(\bar{P}/\bar{Q}) \cos[k_n(b/2)] + \sin[k_n(b/2)]}{\sinh[q_n(b/2)]}.\end{aligned}\tag{46}$$

E para encerrar, este caso de trabalho é o *caso ímpar*, segundo (7), a função do lado esquerdo é *menos igual* à função do lado direito:

$$\begin{aligned}\bar{P}_1(x_-)/\bar{Q} &= -\bar{P}_2(x_+)/\bar{Q}, \\ \bar{B}_1(x_-)/\bar{Q} &= -\bar{B}_2(x_+)/\bar{Q}, \\ \bar{B}_c(x_-)/\bar{Q} &= -\bar{B}_c(x_+)/\bar{Q}.\end{aligned}\tag{47}$$

Por exemplo:

$$\bar{B}_1(-121)/\bar{Q} = -(\bar{D}/\bar{Q}) \exp[-q_n \cdot 121].\tag{48}$$

As peças (45) e (47) montam a função de onda ímpar em toda extensão do DQW. Mantendo a geometria e profundidade do DQW da seção [7.1], a Fig. 7 apresenta a função de onda do primeiro estado excitado — nível de energia  $\epsilon_2 = 3,00$  meV.

## 11 A função de onda normalizada

As seções [9] e [10] deixaram em aberto a quantidade  $Q$ . Pode-se dizer que as funções de onda apresentadas nas Figs. 6 e 7 não estão normalizadas.



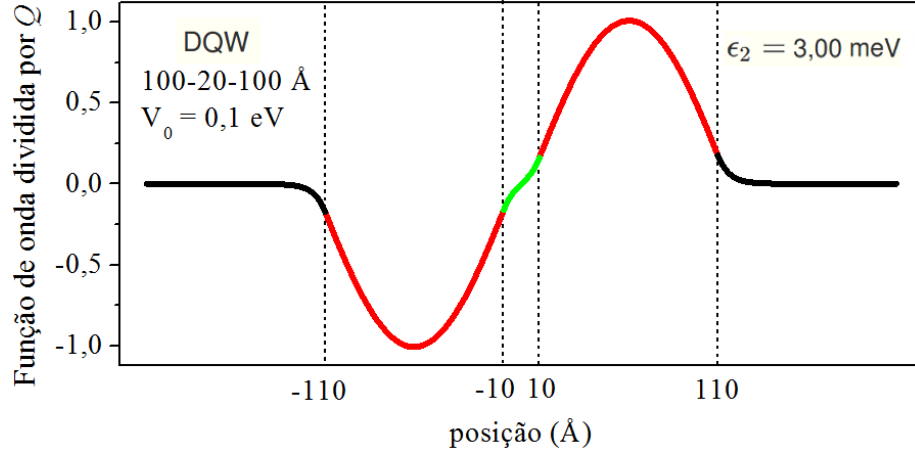


Figura 7: Função de onda do primeiro estado excitado. Ver geometria e profundidade do DQW na própria figura.

O valor de  $Q$  é encontrado pelo processo de normalização de função de onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\Psi(x)}{Q} \right|^2 dx = \frac{1}{|Q|^2}. \quad (49)$$

Lembrando que  $\Psi(x)/Q$  representa uma função de onda *não normalizada*, a Eq. (49) nos leva a concluir que a **área debaixo da curva da densidade de probabilidade não-normalizada** é igual à quantidade  $1/|Q|^2$ .

O valor de  $Q$  está vinculado ao valor de uma área. Há vários softwares que podem calcular áreas de curvas. O método, aqui sugerido, faz uso desses softwares.

Desse modo, tomando as funções de onda das Figs. 6 e 7, as áreas de suas densidades de probabilidade possuem os valores impressos na Tabela 1. Os valores da Tabela 1 são bem parecidos, isso porque as curvas das densidades de probabilidade são quase idênticas — ver a Fig. 8.

Tabela 1: NORMALIZAÇÃO DE FUNÇÃO DE ONDA.

Função de onda	Área da densidade de probabilidade (m)	Valor de $ Q ^2$ ( $\text{m}^{-1}$ )
Par	$1,142 \times 10^{-8}$	$8,757 \times 10^7$

Função de onda	Área da densidade de probabilidade (m)	Valor de $ Q ^2$ ( $\text{m}^{-1}$ )
Ímpar	$1,137 \times 10^{-8}$	$8,797 \times 10^7$

## 12 Considerações finais

A primeira equação escrita no artigo, Eq. (1), estabeleceu o “público-alvo” que se queira atingir. Pode-se dizer que o “publico-alvo” é o elétron no vácuo. Isso é claro, já que a grandeza  $m$ , da Eq. (1), representa massa de repouso do elétron:  $m = 9,11 \times 10^{-31}$  kg. E onde está esse elétron? Não há matéria ao seu redor. O potencial 1 que confina o elétron é construído no vácuo.

Então está faltando algo nesse artigo: a matéria!

Poços quânticos não são construídos no vácuo. A indústria de semicondutores investe pesado no desenvolvimento de materiais semicondutores. Faça uma pesquisa sobre o tema. O resultado vai mostrar que são feitos montantes enormes de investimentos para se alcançar uma posição de destaque na indústria de componentes eletrônicos.

O elétron dentro de um material semicondutor se comporta como uma partícula de massa reduzida. Por exemplo, a massa efetiva do elétron no GaAs é  $0,067 \times 9,11 \times 10^{-31}$  kg, ou seja, um valor **15 vezes menor** que a massa do elétron no vácuo.

E como o fator **massa reduzida** afeta o valor da energia de confinamento?

Este será o tema do próximo artigo, tendo como título:

**Poço Quântico Duplo de Semicondutores.**

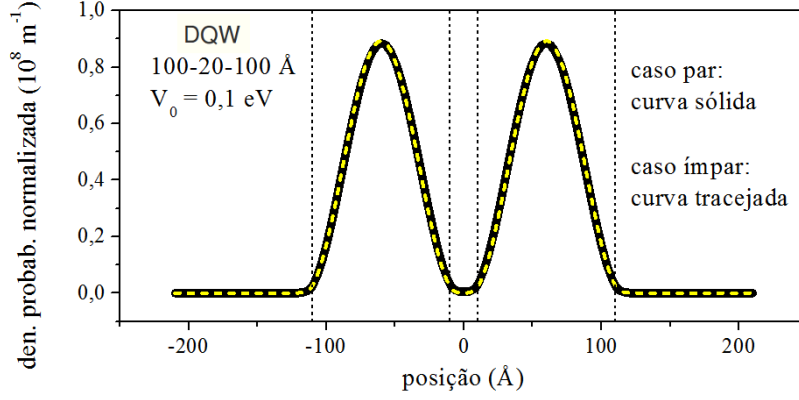


Figura 8: Densidade de probabilidade do estado fundamental e do primeiro estado excitado. As curvas estão normalizadas. DQW: Geometria e profundidade na própria figura.

## Referências

- A. Keshavarz, M. K. (2010). *Linear and nonlinear intersubband optical absorption in symmetric double semi-parabolic quantum wells.*
- J. Ram, S. D. (2006). *Analytical expressions for asymmetric double quantum wells and their application to semiconductor heterostructures.*
- Tetsuya Tada, e. a. (1988). *Tunneling process in AIAs/GsAs double quantum wells studied by photoluminescence.*
- Tsuneo Kamizato, M. M. (1989). *Excitons in double quantum wells.*