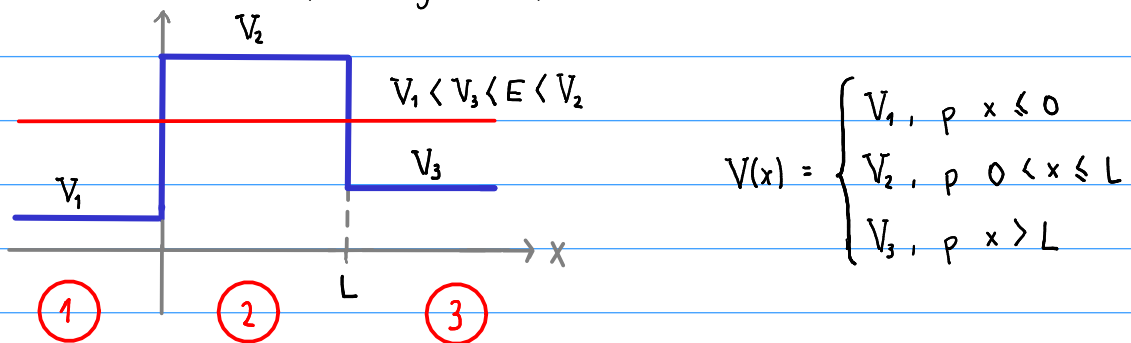


## Tunelamento Quântico em Potencial Barreira

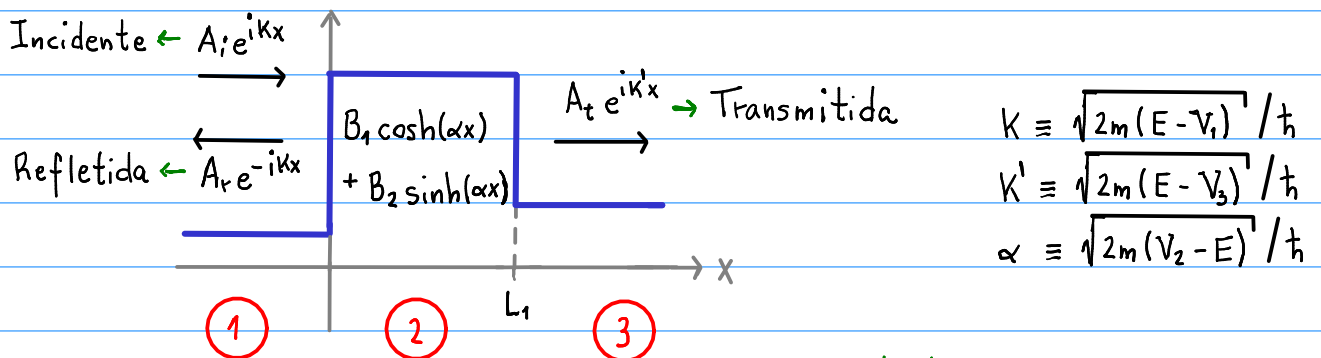
<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/quantum-tunneling/latest/quantum-tunneling.html>

Simulador: Pacotes de Onda e Tunelamento

Um elétron com energia  $E > 0$ , propagando-se na direção  $x \rightarrow \infty$ , incide sobre uma barreira dada pelo seguinte potencial:



(a) Calcule o coeficiente de transmissão.



Ver simulador: Onda Plana  
pacote de Onda

> Soluções de partícula livre:

Região 1

$$\psi_1(x) = A_i e^{ikx} + A_r e^{-ikx} \quad (1)$$

$$\psi_1'(x) = ik(A_i e^{ikx} - A_r e^{-ikx}) \quad (2)$$

Região 3

$$\psi_3(x) = A_t e^{ik'x} \quad (3)$$

$$\psi_3'(x) = ik A_t e^{ik'x} \quad (4)$$

> Soluções dentro das barreiras:

Região 2

$$\psi_2(x) = B_1 \cosh(\alpha x) + B_2 \sinh(\alpha x) \quad (5)$$

$$\psi_2'(x) = \alpha [B_1 \sinh(\alpha x) + B_2 \cosh(\alpha x)] \quad (6)$$

Queremos calcular:

Corrente de probabilidade da onda transmitida

$$T = \left| \frac{j_T}{j_i} \right|; \quad j_i = \frac{\hbar K}{m} |A_i|^2 \quad \text{e} \quad j_T = \frac{\hbar K'}{m} |A_t|^2 \Rightarrow T = \left| \frac{A_t}{A_i} \right|^2 \frac{K'}{K} \quad (*)$$

Corrente de probabilidade da onda incidente

Sabendo  $A_T$  em função de  $A_i$ , podemos calcular  $T$ . Para isso vamos considerar as condições de contorno:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_i + A_r = B_1 \quad (7)$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow iK(A_i - A_r) = \alpha B_2 \quad (8)$$

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow B_1 \cosh(\alpha L) + B_2 \sinh(\alpha L) = A_t e^{iK'L} \quad (9)$$

$$\psi_2'(L) = \psi_3'(L) \Rightarrow \alpha [B_1 \sinh(\alpha L) + B_2 \cosh(\alpha L)] = iK'A_t e^{iK'L} \quad (10)$$

Temos 4 equações ((7), (8), (9) e (10)) e 5 variáveis ( $A_i, A_r, A_t, B_1$  e  $B_2$ ). Podemos, então, escrever  $A_r, A_t, B_1$  e  $B_2$  em função de  $A_i$ . Nos interessa  $A_t$  em função de  $A_i$ .

> Estratégia: Das eqs. (7) e (8) escrever  $A_i$  em função de  $B_1$  e  $B_2$ . Então, pelas eqs. (9) e (10) escrever  $B_1$  e  $B_2$  em função de  $A_t$ . Por fim, substituir  $B_1 = f(A_t)$  e  $B_2 = g(A_t)$  em  $A_i = h(B_1, B_2)$ .

$$\text{Fazendo (7) + (8) / } iK: 2A_i = B_1 - i(\alpha/K)B_2 \quad (11)$$

Fazendo (9)  $\times$   $\cosh(\alpha L)$  - (10)  $\times$   $\sinh(\alpha L)$  /  $\alpha$ :

$$[\cosh^2(\alpha L) - \sinh^2(\alpha L)] B_1 = [\cosh(\alpha L) - i(K/\alpha) \sinh(\alpha L)] A_t e^{iK'L} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow B_1 = [\cosh(\alpha L) - i(K/\alpha) \sinh(\alpha L)] A_t e^{iK'L} \quad (12)$$

Fazendo (9)  $\times \sinh(\alpha L) - (10) \times \cosh(\alpha L) / \alpha$ :

$$[\cancel{\sinh^2(\alpha L)} - \cosh^2(\alpha L)] B_2 = [\sinh(\alpha L) - i(k'/\alpha) \cosh(\alpha L)] A_t e^{ik'L} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow B_2 = -[\sinh(\alpha L) - i(k'/\alpha) \cosh(\alpha L)] A_t e^{ik'L} \quad (13)$$

Substituindo  $B_2$  e  $B_1$  de (12) e (13) em (11):

$$A_i = \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k}\right) \cosh(\alpha L) + i \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k'}{\alpha}\right) \sinh(\alpha L) \right] A_t e^{ik'L}$$

$$\equiv z = |z| e^{i\theta} \text{ (Forma Polar)}$$

$$|z| = \frac{1}{2} \left[ \left(1 + k'/k\right)^2 \cosh^2(\alpha L) + \left(\alpha/k - k'/\alpha\right)^2 \sinh^2(\alpha L) \right]^{1/2} \quad (14)$$

$$\tan \theta = \frac{\alpha/k - k'/\alpha}{1 + k'/k} \tanh(\alpha L), \quad \therefore A_t = \frac{A_i}{|z|} e^{-i\theta} e^{-ik'L}$$

Podemos controlar (preparação do pacote de onda)

$$A_i = |A_i| e^{i\delta} \Rightarrow A_t = |A_i|/|z| \exp\{-i(\theta + k'L + \delta)\} \quad (15) \Rightarrow |A_t| = |A_i|/|z| \quad (16)$$

(forma polar)

Das eqs. (\*) e (16):

$$T = \frac{k'}{k} \frac{1}{|z|^2} \quad (17) \Rightarrow T = \frac{4k'}{k} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k}\right)^2 \cosh^2(\alpha L) + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k'}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha L) \right]^{-1}$$

De (14)

$$e^1 \pm e^{-1} = 2.72 \pm 0.37$$

$$e^2 \pm e^{-2} = 7.39 \pm 0.16$$

Quando  $\alpha L$  é grande:  $e^{\alpha L} \pm e^{-\alpha L} \approx e^{\alpha L} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \cosh^2(\alpha L) \approx \sinh^2(\alpha L) \approx e^{2\alpha L}/4 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T \approx \frac{k'/k}{\left(1 + k'/k\right)^2 + \left(\alpha/k - k'/\alpha\right)^2} e^{-2\alpha L}$$

(b) Verifique o coeficiente de transmissão  $T$  para o caso  $V_1 = V_3 = 0$  e compare com o resultado obtido em aula.

$$\text{Com } V_1 = V_3 = 0 \Rightarrow K' = K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow T = 4 \left[ 4 \cosh^2(\alpha L) + \left( \frac{\alpha - K}{K \alpha} \right)^2 \sinh^2(\alpha L) \right]^{-1}$$

$$\text{Considerando } \left( \frac{\alpha - K}{K \alpha} \right)^2 = \frac{\alpha^2 + K^2}{K^2 \alpha^2} - 2 = \frac{\alpha^2 + K^2}{K^2 \alpha^2} + 2 - 4 = \left( \frac{\alpha + K}{K \alpha} \right)^2 - 4 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T = 4 \left[ 4 \cosh^2(\alpha L) - 4 \sinh^2(\alpha L) + \left( \frac{\alpha + K}{K \alpha} \right)^2 \sinh^2(\alpha L) \right]^{-1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} (\alpha/K + K/\alpha)^2 \sinh^2(\alpha L)}, \quad \frac{\alpha + K}{K \alpha} = \frac{\alpha^2 + K^2}{\alpha K} = \frac{V_2 - E + E}{\sqrt{E(V_2 - E)}} = \frac{V_2}{\sqrt{E(V_2 - E)}}$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_2^2}{4E(V_2 - E)} \sinh^2(\alpha L)}$$

→ Resultado obtido em aula

Veja no simulador que  $T$  é pouco sensível a mudança de  $V_1$  e  $V_3$  e muito sensível a mudança de  $V_2$ .

(c) Escreva as funções de onda estacionária (parte espacial) da onda transmitida e refletida em função do coeficiente de transmissão, reflexão e da amplitude da onda incidente.

$$\psi_t(x) = A_t e^{ik'x} \xrightarrow{\text{De (15)}} |A_i/z| \exp\{-i(\theta + k'L + \varphi)\} e^{ik'x} \xrightarrow{\text{De (17)}} \Rightarrow$$

↳ onda transmitida

$$\Rightarrow \psi_t(x) = \underbrace{\sqrt{(K/K')T}}_{\text{Amplitude}} |A_i| e^{i\varphi} \underbrace{e^{ik'x}}_{\text{Evolução espacial}}, \quad \varphi = -(\theta + k'L + \varphi)$$

$$\psi_r(x) = A_r e^{-ikx} \quad (18) \quad \xrightarrow{\text{Corrente de probabilidade da onda refletida}} R = |j_r/j_i|, \quad j_r = \frac{\hbar K}{m} |A_r|^2, \quad j_i = \frac{\hbar K}{m} |A_i|^2$$

↳ onda refletida      ↳ Coef. de reflexão

$$\therefore R = |A_r/A_i|^2 = 1 - T \Rightarrow |A_r| = \sqrt{R} |A_i| \quad (19)$$

↓  
Conservação de probabilidade

$A_r = |A_r| e^{i\xi}$ , sabemos  $|A_r|$  mas não sabemos a fase  $\xi$ . Podemos descobri-la retornando as condições de contorno de forma semelhante à  $A_r$  (deixo a critério de vocês).

$$\therefore \psi_r(x) = \sqrt{R} |A_i| e^{i\xi} e^{-ikx}$$

Ver no simulador que o comportamento de  $\psi_i$ ,  $\psi_r$  e  $\psi_i + \psi_r$

- (d) Calcule o coeficiente de transmissão  $T$  para  $L = 1 \text{ nm}$  e  $L = 0.8 \text{ nm}$  considerando  $V_1 = 0.25 \text{ eV}$ ,  $V_2 = 1 \text{ eV}$ ,  $V_3 = 0.5 \text{ eV}$  e  $E = 0.75 \text{ eV}$ . Compare o valor obtido com o valor do simulador.

$$T = \frac{4 \frac{K'}{K} \left[ \left(1 + \frac{K'}{K}\right)^2 \cosh^2(\alpha L) + \left(\frac{\alpha}{K} - \frac{K'}{\alpha}\right)^2 \sinh^2(\alpha L) \right]^{-1}}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{K'}{K} = \frac{(E - V_3)^{1/2}}{(E - V_1)^{1/2}} = \frac{(0.25)^{1/2}}{(0.50)^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.71 \\ \frac{\alpha}{K} = \frac{(V_2 - E)^{1/2}}{(E - V_1)^{1/2}} = \frac{(0.25)^{1/2}}{(0.50)^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.71 \\ \frac{K'}{\alpha} = \frac{(E - V_3)^{1/2}}{(V_2 - E)^{1/2}} = \frac{(0.25)^{1/2}}{(0.25)^{1/2}} = 1 \end{array} \right\} \begin{array}{l} 1 + \frac{K'}{K} \approx 1.71 \\ \frac{\alpha}{K} - \frac{K'}{\alpha} \approx -0.29 \end{array}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_2 - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2E_0(V_2 - E)}}{\hbar c} = \frac{\sqrt{2 \times 0.5 \times 10^6 \text{ eV} \times 0.25 \text{ eV}}}{197.33 \text{ eV} \cdot \text{nm}} \approx \frac{500.00 \text{ nm}^{-1}}{197.33} = 2.53 \text{ nm}^{-1}$$

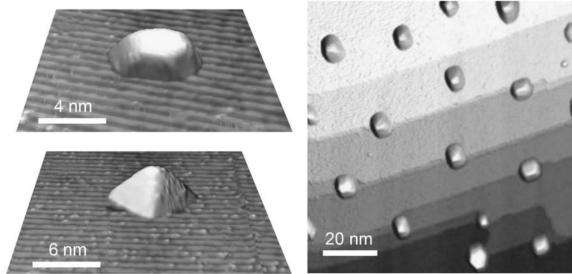
- > Caso  $L = 1 \text{ nm}$ :  $\alpha L \approx 2.53 \Rightarrow T \approx 0.02 = 2\%$  e  $R = 1 - T \approx 98\%$

↑ verificar simulador  
↓ Transmissão triplicou!

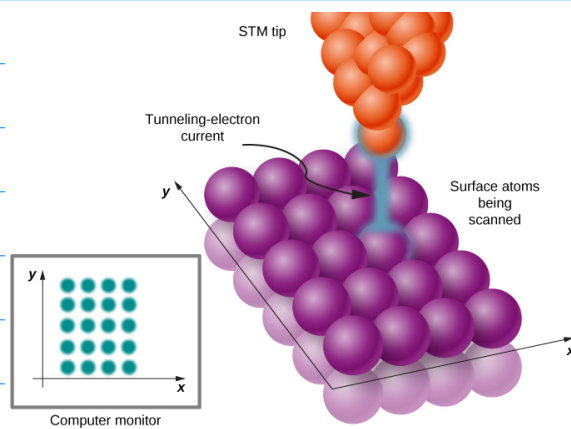
- > Caso  $L = 0.8 \text{ nm}$ :  $\alpha L \approx 2.02 \Rightarrow T \approx 0.06 = 6\%$  e  $R = 1 - T \approx 94\%$

Veja no simulador que  $T$  é muito sensível a mudança de  $L$ .

Uma das aplicações desse tipo de potencial é o Microscópio de Varredura por Tunelamento, do inglês scanning tunneling microscope (STM), cuja principal função é mapear superfícies com resolução atômica ( $\sim 0.1 \text{ nm}$ ). Esse instrumento foi criado por dois pesquisadores da IBM, Gerd Binnig e Heinrich Rohrer, em 1981, os quais receberam o prêmio Nobel em 1986 pelo feito.



Scanning tunneling microscopy images of size- and shape-selected platinum nanoparticles supported on  $\text{TiO}_2(110)$  [Source: Farza Behafarid and Beatriz Roldan Cuenya, Department of Physics, University of Central Florida.]



Um STM é composto basicamente por uma ponta fina condutora ligada à três piezoelétricos que permitem uma movimentação com precisão nanométrica. Quando a ponta se aproxima de uma superfície, elétrons podem fluir via tunelamento quântico estabelecendo uma corrente conhecida

como corrente de tunelamento. Essa corrente é extremamente sensível a distância entre a ponta e a superfície.

Uma maneira de mapear uma superfície com um STM é movendo a ponta mantendo a corrente de tunelamento constante através de um sistema de retroalimentação. Outra maneira seria mover a ponta de forma constante e detectar a variação da corrente de tunelamento.

