

Monitoria MQ 21/04

(Dated:)

Exercício 1 Nos últimos anos, a física de estado sólido e a óptica tem vivenciado uma revolução com o desenvolvimento de novos materiais na escala nanoscópica. Como exemplo, considere pequeninas esferas de CdTe, cujo diâmetro é da ordem de $\sim 1\text{nm}$, e são conhecidas por quantum dots QD. Dependendo do modo de fabricação, podem ser considerados objetos 0-dimensionais. Essa redução espacial resulta, de certo modo, na localização eletrônica. Conseqüentemente, o espectro de emissão (ou fluorescência) de um QD depende de seu comprimento L . Diversas outras propriedades também são afetadas, adicionando uma enorme flexibilidade para aplicações.



Figura 1. Fluorescência de QD CdTe para diversos comprimentos L .

Neste exercício, vamos aprender um pouco mais sobre estes objetos utilizando as noções de poços quânticos. O modelo é descrito da seguinte maneira: assume-se que QD são objetos essencialmente planos (2D com área L^2) e seus elétrons são fortemente ligados ao QD mas a interação entre elétrons é muito fraca.

- Assuma que a energia de ligação entre os núcleos de CdTe e os elétrons é essencialmente constante e idêntica para todos. Essa hipótese determina uma região equipotencial $V_0 < 0$ no plano para elétrons ligados. Qual deve ser a energia potencial para elétrons fora do QD?
- Determine a energia potencial para o QD, considerando $(x, y) = 0$ na origem do QD. Grafique.
- Sem determinar os autoestados e autoenergias, qual deve ser o sinal da energia para elétrons ligados? E para não ligados? A energia total deve ser função da posição ou do momento? Quantos números quânticos devem ser considerados para identificar cada autoestado?
- Utilizando o princípio da incerteza, verifique que quanto menor for o QD, menor será o comprimento de onda da luz emitida.
- Determine o espectro de energia e os autoestados considerando $V_0 \rightarrow -\infty$.
- Se o estado inicial do sistema for uma combinação linear entre o primeiro e o quinto autoestado, qual é o estado no tempo t ? Ele é par ou ímpar?

Exercício 2 Considere um certo núcleo atômico ($Z \gg 1$), representado pelo ket $|\psi\rangle$ que pode ser encontrado em duas configurações distintas: o estado fundamental $|g\rangle$ e o estado excitado $|e\rangle$. A energia associada à transição nuclear $e \rightarrow g$

é $\Delta E \approx 1.05\text{MeV}$, e é acompanhada pela emissão de radiação γ . Dependendo das características do meio circundante, observa-se a destruição do fóton com subsequente criação de um par $e + \bar{e}$, em direções geralmente opostas e com conservação do momento angular total do processo.

Digamos que seja possível medir com precisão a posição do núcleo, num plano, através da detecção do par $e + \bar{e}$. O plano quadrado possui área total L^2 e está sob ação de um potencial confinante

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x_1| \leq L/2 \text{ e } |x_2| \leq L/2, \\ V_0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (1)$$

com $V_0 \gg \Delta E$. Assuma que os sensores externos sejam perfeitos e estão operando a 4.2K (He líquido). Em $t = 0$, determinou-se que o núcleo estava na origem $x_1 = x_2 = 0$.

- Considerando as posições do plano espacial (2D), quantos números quânticos são necessários para caracterizar o ket $|\psi\rangle$? Justifique e represente $|\psi\rangle$ utilizando tais números.
- Discuta o papel do operador potencial no plano. Faça uma representação gráfica.
- A condição $V_0 \gg \Delta E$ é suficiente para garantir o confinamento? Justifique.
- Escreva o operador hamiltoniano \mathbb{H} do núcleo em todo espaço. Não inclua nenhum evento de emissão/absorção de fótons.
- Determine as autoenergias e autoestados de \mathbb{H} na base dos momenta \vec{k} assumindo confinamento ideal.
- Expresse $|\psi(t=0)\rangle$ utilizando os autoestados como base.
- Determine $|\psi(t)\rangle$.

Exercício 3 Um elétron (carga e) encontra-se parcialmente confinado num plano por um potencial $V(r)$. Sua função de onda foi meticulosamente medida e é

$$\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{-(r-r_0)^2/4\sigma^2}, \quad (2)$$

onde m é um número inteiro (0 incluso). Aqui, $V(r) = 0$ se $r_0 - \sigma \leq r \leq r_0 + \sigma$ e $V(r) \rightarrow +\infty$ caso contrário.

- Determine o operador \mathbb{H} .
- Determine a densidade de probabilidade para encontrar o elétron na posição \vec{r} . Justifique seus resultados e tente desenhar a posição eletrônica nesse meio.
- Utilizando o princípio da incerteza, estime as flutuações de \mathbb{p}_r . O que acontece com as flutuações de \mathbb{p}_r quando $\sigma \rightarrow 0$.
- Mostre que $[\mathbb{p}_\varphi^2, \mathbb{H}] = 0$. Qual seu significado físico? Utilize o princípio da incerteza e confirme os resultados do item b.
- Mostre que a energia $E_{m=0}(r = r_0)$ é não nula e depende intrinsecamente de σ^2 .

Exercício 4 Vimos algumas das propriedades mais simples dos poços de potenciais quando os potenciais confinantes são infinitos. Vejamos agora o caso onde o potencial confinante

é finito. A principal consequência física é que a partícula considerada pode ser encontrada fora do poço. Dado um poço 1D, cujo potencial é

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -L < x < L \\ V_0 > 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3)$$

determine

- as autoenergias e autoestados para $|x| < L$.
- as autoenergias e autoestados para $|x| \geq L$.
- a probabilidade de encontrar a partícula no interior do poço.
- resolva os itens a-c assumindo V_0 negativo. Esse é o caso de barreira de potencial. Determine a probabilidade de uma partícula atravessar completamente a barreira.

Exercício 5 Claramente, o modelo de poço finito é uma idealização a partir da qual podemos extrair conclusões a respeito do tunelamento de elétrons. Por ser um poço de potencial, é razoável esperar que a densidade de partículas no seu interior seja maior que a densidade ao redor. Essa observação incrementa a eficiência de recombinações eletrônicas, permitindo o desenvolvimento de dispositivos semicondutores emissores de luz coerente (laser). Neste caso, utiliza-se uma sequência de poços tal qual ilustra a figura abaixo.

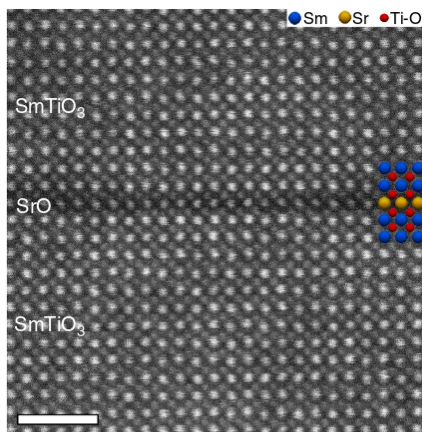


Figura 2. Microscopia: superrede de SrO+SmTiO₃. Cada fileira de SrO representa uma camada Ref. [1] (2014).

Suponha que o potencial de cada poço seja $V_0 \approx -1$ eV e que o potencial do meio circundante seja $V_{\text{meio}} \approx 0$.

- O potencial de cada poço em questão é suficiente para manter um único elétron confinado, considerando-se $k_b T = 0.025$ eV (energia térmica a 300K)?
- Cada poço pode comportar vários elétrons. Cada modo normal pode comportar até dois elétrons devido ao grau de liberdade de spin. Qual a densidade ρ de elétrons que um poço bidimensional é capaz de confinar? Desconsidere efeitos de temperatura em sua primeira análise.
- As constantes dielétricas dos poços e do meio são diferentes, o que resulta na formação de cavidades óticas. Tomando a figura como referência, o que acontece com os elétrons confinados no interior de cada poço caso o material seja colocado dentro de um capacitor perfeito de placas paralelas (poço paralelo às placas)?
- Gedanken** Um físico experimental decide fabricar uma bandeira ligada a um resistor R (que realiza trabalho) por meio de um fio de cobre, todos encontram-se na temperatura ambiente. A bandeira é formada por material semicondutor semelhante a um tecido, constituído por poços de potencial. Ao tremular com o vento, a largura do poço é gentilmente comprimida. Assumindo que todos os elétrons ejetados sejam capturados, qual a diferença de potencial observada no resistor? É uma ideia viável? O que poderia atrapalhar ou melhorar seu desempenho? Justifique.

OBS: no começo deste ano, um pequeno grupo de cientistas publicou uma bandeira piezoelétrica como mecanismo de geração de energia eólica.

Exercício 6 Considere o seguinte operador hamiltoniano:

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0 \cos(k_0 z). \quad (4)$$

Determine as autoenergias e os autoestados no espaço dos momenta.

[1] C. A. Jackson, J. Y. Zhang, C. R. Freeze, and S. Stemmer, Nature Communications **5** (2014).