



INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO PIAUÍ
CAMPUS PARNAÍBA
LICENCIATURA EM FÍSICA

TIAGO DA SILVA COSTA

**ESTUDO DE SISTEMAS QUÂNTICOS UNIDIMENSIONAIS USANDO O
MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA: UMA ABORDAGEM
USANDO PYTHON**

PARNAÍBA-PI

2023

TIAGO DA SILVA COSTA

**ESTUDO DE SISTEMAS QUÂNTICOS UNIDIMENSIONAIS USANDO O
MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA: UMA ABORDAGEM
USANDO PYTHON**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
à Banca Examinadora como requisito parcial
para obtenção do diploma do Curso de Li-
cenciatura em Física do Instituto Federal de
Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí.

Orientador: Prof. Me. Itamar Vieira de
Sousa Júnior

PARNAÍBA-PI

2023

TIAGO DA SILVA COSTA

**ESTUDO DE SISTEMAS QUÂNTICOS UNIDIMENSIONAIS USANDO O
MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA: UMA ABORDAGEM
USANDO PYTHON**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
à Banca Examinadora como requisito parcial
para obtenção do diploma do Curso de Li-
cenciatura em Física do Instituto Federal de
Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí.

Aprovado pela banca examinadora em _____.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Me. Itamar Vieira de Sousa Júnior (Orientador)
IFPI - Campus Parnaíba

Prof. Dr. Francisco Ronan Viana Araújo (Coorientador)
IFPI - Campus São Raimundo Nonato

Prof. Dr. Alexandro das Chagas de Sousa Nascimento (Membro da Banca)
UFC - Campus do Pici

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Membro da Banca)
UFC - Campus do Pici

PARNAÍBA-PI

2023

Dedico este trabalho a família
e a todos aqueles que buscam seus
sonhos em meio a tantas dificuldades.

AGRADECIMENTOS

Começo agradecendo a minha família, particularmente a minha mãe Angela Maria C. da Silva e meu pai Sebastião M. da Costa Filho, pelo apoio incondicional e fundamental que me deram durante todo o meu percurso acadêmico. Eles foram fundamentais para que eu pudesse me dedicar plenamente e alcançar os meus objetivos.

Gostaria também de agradecer sinceramente aos meus professores, em especial ao meu orientador, Itamar V. Sousa Jr., ao professor Alexandro C. S. Nascimento, ao professor Francisco Ronan V. Araújo e ao professor Diego R. da Costa pelas valiosas contribuições, ensino, incentivo e orientação constante à minha formação intelectual. A paixão e o amor pela física transmitidos por eles foram fundamentais para que eu pudesse encontrar o conhecimento e a motivação necessários para o desenvolvimento deste trabalho. E especialmente ao professor Diego R. da Costa pela disponibilidade em apoio no curto período de Iniciação Científica, durante a pandemia, que foi fundamental para eu optar estudar sistemas de barreira.

Agradeço também a todos os demais professores e colegas de curso pelo apoio, colaboração e pelas discussões significativas que tivemos ao longo deste período.

Não posso deixar de agradecer também à minha instituição de ensino pelas valiosas oportunidades e recursos disponibilizados, que foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho.

*“É preciso sonhar, mas com a condição
de crer em nosso sonho. De observar com
atenção a vida real, de confrontar a observação
com nosso sonho, de realizar escrupulosamente nossas
fantasias. Sonhos, acredite neles.”
- Vladimir Lênin (1902)*

RESUMO

O desenvolvimento científico e tecnológico de uma sociedade está intimamente relacionado com a compreensão de conceitos fundamentais de áreas essenciais do conhecimento. As propriedades peculiares de transmissão de elétrons em barreiras de potencial elétrico no contexto da Mecânica Quântica, por exemplo, serviu como base para desenvolvimento de diversos dispositivos baseados em heteroestruturas compostas de semicondutores. Além disso, múltiplos poços quânticos e super-redes também tem se tornado estruturas importantes e atraentes para aplicações em dispositivos ópticos e eletrônicos. Diferentes abordagens teóricas tem emergido para modelar tais estruturas. A técnica da matriz de transferência, por exemplo, é um método útil e acessível para estudar uma variedade de sistemas quânticos unidimensionais que são baseadas em sistemas de múltiplas barreiras e poços. Além do escopo da Física da Matéria Condensada, sistemas físicos em diversas outras áreas tais como Mecânica Estatística e Óptica também se utilizam desse poderoso e compacto formalismo. A metodologia empregada nesse trabalho será baseada no desenvolvimento, de forma analítica, da matriz de transferência de um sistema multi-barreiras retangulares dentro do contexto da mecânica quântica não-relativística, usando equação de Schrödinger. As soluções para um número arbitrário de barreiras simétricas serão generalizadas e implementadas na linguagem de programação Python, com códigos computacionais disponibilizados de forma didática e detalhada. Os resultados analisados partem da estrutura de barreira simples, que é amplamente estudada nos cursos de Introdução à Física Moderna, até um sistema de barreiras infinitas (super-redes) onde as propriedades de transmissão e espectro de energia são analisados. Esperamos que este material possa ser útil como ponto de partida para que estudantes possam ampliar seus conhecimentos à respeito das propriedades desses tipos de sistemas quânticos e abrir portas para novos estudos.

Palavras-chaves: Matriz de transferência. Barreiras de potencial. Super-redes. Semicondutores. Python.

ABSTRACT

The scientific and technological development of a society is closely related to the understanding of fundamental concepts of essential areas of knowledge. The peculiar properties of electron transmission in electric potential barriers in the context of Quantum Mechanics, for example, served as the basis for developing several devices based on heterostructures composed of semiconductors. Furthermore, multiple quantum wells and superlattices have also become important and attractive structures for applications in optical and electronic devices. Different theoretical approaches have emerged to model such structures. The transfer matrix technique, for example, is a useful and affordable method for studying a variety of one-dimensional quantum systems that are based on multiple barriers and well systems. In addition to the scope of Condensed Matter Physics, physical systems in several other areas, such as Statistical Mechanics and Optics, also use this powerful and compact formalism. The methodology used in this work will be based on the analytical development of the transfer matrix of a rectangular multi-barrier system within the context of non-relativistic quantum mechanics, using Schrödinger's equation. The solutions for an arbitrary number of symmetric barriers will be generalized and implemented in the Python programming language, with computational codes made available in a didactic and detailed way. The analyzed results start from the simple barrier structure, which is widely studied in Introduction to Modern Physics courses, to a system of infinite barriers (superlattices) where the transmission properties and energy spectrum are analyzed. We hope this material can be useful as a starting point for students to expand their knowledge about the properties of these quantum systems and open doors to new studies.

Keywords: Transfer matrix. Potential barrier. Superlattices. Semiconductors. Python.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Barreira de potencial retangular simples, onde V_0 é a altura da barreira e a é a largura.	23
Figura 2 – Barreira de potencial retangular simples, onde V_0 é a altura da barreira e a é a largura. Na parte (a) observa-se as respectivas regiões, enquanto em (b) vemos os coeficientes de incidências (A_i), de reflexão (B_i) para cada região.	25
Figura 3 – Coeficiente de transmissão $T(E)$ em função da energia E para um potencial retangular de altura de $V_0 = 10$ eV e largura $a = 2$ nm. A curva em vermelho tracejado é o resultado clássico enquanto a curva azul contínua é o resultado quântico.	29
Figura 4 – Dupla barreira de potencial.	34
Figura 5 – Barreira dupla de potencial, onde V_0 e a são a altura e largura da barreira, respectivamente, e b é a largura do poço entre as barreiras. Em (a) destacamos todas as regiões do sistema, enquanto em (b) mostramos os coeficientes e os sentidos de propagação das ondas para cada região. . .	35
Figura 6 – Representação de um número finito N de barreiras de potencial retangular. Em azul, destacamos uma célula unitária que pode ser usada para gerar essa rede de barreiras.	36
Figura 7 – Exemplo de super-rede como uma estrutura infinita de potenciais periódicos. Temos poços de largura b alternando com barreiras de espessura a e altura V_0 . A constante de rede (ou super-rede) é definida como $L = a + b$	39
Figura 8 – (a) Relação de dispersão $E(K)$ em uma representação de zona estendida. A zona delimitada por $0 \leq K \leq \pi/L$ é denominada zona de Brillouin. (b) Relação de dispersão $E(K)$ em uma representação de zona reduzida (dentro da zona de Brillouin). A curva parabólica contínua em (a) representa a relação de dispersão para elétrons livres. A curva tracejada em (b) mostra a parte imaginária do número de onda nas zonas proibidas (<i>gaps</i>).	42
Figura 9 – Probabilidade de transmissão T versus energia E , em eV, para uma barreira de potencial retangular simples. Os parâmetros para a barreira são $V_0 = 10$ eV e $a = 2$ nm.	50
Figura 10 – Probabilidade de energia E versus transmissão T para um elétron interagindo com uma barreira de potencial simples $N = 1$ com altura (a) $V_0 = 5$ eV, (b) $V_0 = 10$ eV, (c) $V_0 = 15$ eV e (d) $V_0 = 20$ eV. Em todos os casos, a largura da barreira é fixada em 1 nm.	52

Figura 11 – O gráfico mostra o coeficiente de transmissão através de uma barreira retangular de largura variando de 1 a 4 nanômetros para uma altura de barreira fixa $V_0 = 10$ eV.	53
Figura 12 – Barreira de potencial retangular dupla simétrica com largura de barreira de 0,1 nm, largura de poço de 0,4 nm e energia de barreira de 10 eV. Há uma ressonância na energia E_0 para um elétron de massa m_0 em tal potencial. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da energia, e uma ressonância de transmissão unitária ocorre na energia $E = E_0 = 132$ meV.	54
Figura 13 – Barreira de potencial retangular dupla simétrica com largura de barreira de 0,1 nm, largura de poço respectivamente de 2 e 4 nm e energia de barreira de 10 eV. Há uma ressonância na energia E_0 para um elétron de massa m_0 em tal potencial. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da largura do poço entre as barreiras.	55
Figura 14 – Barreira de potencial retangular tripla e simétrica com largura de barreira de 0,1 nm, largura de poço de 0,4 nm e energia de barreira de 10 eV. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da energia, e uma ressonância de transmissão unitária ocorre nos primeiros picos, nas respectivas energia $E_1 = 1,2$ eV e $E_2 = 1,46$ eV.	56
Figura 15 – Plot do da energia E em função do coeficiente de transmissão T para uma rede composta por 5 barreiras simétricas de potencial de 10 eV.	56
Figura 16 – Plot da energia E em função do coeficiente de transmissão T para uma rede composta por 20 barreiras simétricas de potencial de 10 eV. Nesse tipo de configuração pode-se observar o efeito de tunelamento ressonante presente em sólidos cristalinos.	57
Figura 17 – Probabilidade de transmissão T versus energia E para um elétron de energia potencial modelado por N barreiras idênticas ($V_0 = 0,5$ eV, $L = 2$ nm) separadas umas das outras por 4 nm.	58
Figura 18 – Estrutura de bandas de super-rede simétrica com diferentes para diferentes valores da barreira de potencial: 5, 10, 15 e 20 eV.	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

TICs	Tecnologias de Informação e Comunicação
MT	Matriz de Transferência
PC	Pensamento Computacional
BNCC	Base Nacional Comum Curricular
ESIT	Equação de Schrödinger Independente do Tempo
KP	Kronig-Penney

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	FÍSICA E TECNOLOGIA: OS DESAFIOS DO ENSINO DE FÍSICA SOBRE O MUNDO MODERNO	16
2.1	FORMAÇÃO DE PROFESSORES FRENTE ÀS TECNOLOGIAS	18
2.2	COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA: PORQUE UTILIZAR A LINGUAGEM <i>PYTHON</i>	19
3	A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E SISTEMAS DE BARREIRAS	21
3.1	BARREIRA DE POTENCIAL SIMPLES	23
3.1.1	Transmissão via substituição de coeficientes	25
3.1.2	Transmissão via relações matriciais	30
3.2	BARREIRA DE POTENCIAL DUPLA	33
3.3	N BARREIRAS DE POTENCIAL	36
3.4	SUPER-REDES E O MODELO KRONIG-PENNEY PARA BARREIRAS DE POTENCIAL	39
4	METODOLOGIA	44
4.1	PROGRAMANDO EM <i>Python</i>	44
4.2	BARREIRA SIMPLES E DUPLA	44
4.3	N BARREIRAS	46
4.3.1	Efeitos em super-redes	48
5	RESULTADOS	50
5.1	BARREIRA SIMPLES	50
5.2	N BARREIRAS	51
5.3	SUPER-REDES	59
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	61
	REFERÊNCIAS	63
	ANEXOS	66
	ANEXO A – CÓDIGOS - MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA - BARREIRA SIMPLES	67

ANEXO B – CÓDIGOS - MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA - N BARREIRAS	69
--	----

1 INTRODUÇÃO

Grande parte da tecnologia contemporânea é fruto do desenvolvimento da Mecânica Quântica na primeira metade do século XX. A integração de dispositivos à base de semicondutores possibilitou o surgimento de computadores, *smartphones*, lasers, ressonância magnética, lâmpadas de LED, e mais uma gama de equipamentos tão presentes em nosso cotidiano. Tal desenvolvimento tecnológico provocou uma enorme mudança nos costumes da sociedade moderna e provavelmente continuará com esse papel nos próximos anos.

Nesse contexto, as Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs) devem permear o ensino em diversas áreas do conhecimento e, principalmente, o ensino de Física. Moreira (2018) destaca que o ensino de Física no século XXI deve ser desenvolvido com a utilização de ferramentas modernas tais como simulações ou modelagens computacionais, laboratórios virtuais e aplicativos educacionais para *smartphones*. Além disso, o ato de ensinar deve estar intimamente relacionado à construção de uma visão de mundo mais atrelada à realidade imediata do educando. Em suma, é desejável uma intersecção clara entre o que é ensinado e o que é vivenciado pelo estudante. Essa postura é enfatizada em grande parte da literatura educacional como indispensável na construção de uma didática atrativa.

Nas discussões acerca de um ensino com mais significado, propostas no Ensino de Física têm demonstrado que a necessidade da presença da Física Moderna no currículo do Ensino Médio, é uma consequência inevitável. O motivo, como aponta Greca e Moreira (2001), deve-se ao “afastamento” da física ensinada nas escolas e da física que propulsiona o mundo moderno. A problemática quanto a defasagem na formação do professor de Física e a nova realidade educacional supracitada, chocam-se quando pensa-se na figura do professor como agente de intersecção entre as partes aluno e conhecimento. Dessa maneira, como lidar com as novas tendências de ensino ao mesmo tempo que busca-se suprir o déficit da presença da Física Moderna em sala de aula? Como os professores podem enfrentar a nova realidade segundo a postura “*self empreendedor*” agora tão presente no planejamento curricular?

Uma gama de possibilidades podem ser apresentadas, diferindo apenas quanto a abordagem. Contudo, não há caminho que se distancie da formação docente atrelada ao estudo de aplicações tecnológicas em objetos educacionais. Assim, é imprescindível que os professores de Física tenham um treinamento para construir meios de solução do problema dual aqui exposto. A demanda por um Ensino de Física que contemplem a contemporaneidade, parte, dentre tantas bases, de uma formação de professores mais íntima ao domínio de tecnologias. Não obstante, o uso das TICs é comumente utilizado nas ciências como ferramental necessário para coleta e análise de dados, ou seja, é parte fundamental do método científico das ciências de base. Dessa maneira, o uso de tais ferramentas

desempenham um horizonte de possibilidades frente à nova perspectiva profissional para o professor de Física.

Além disso, o ensino de Mecânica Quântica é considerado uma parte importante da formação em Física (SOUZA; SILVA; TEIXEIRA, 2021). A respeito do ensino dela, embora o trato de matrizes represente parte importante do currículo dos cursos de física, engenharia e afins, as Matrizes de Transferência (MT) raramente são discutidas em livros-textos padrão de graduação. O uso de MT consiste em uma técnica fundamental na análise de sistemas lineares e dinâmicos. Ela é amplamente utilizado na modelagem e análise de sistemas elétricos, mecânicos, acústicos, entre outros. A sua utilização permite descrever a relação entre a entrada e a saída do sistema, fornecendo informações valiosas sobre as propriedades dinâmicas desses sistemas, tais como estabilidade, resposta ao degrau e resposta ao impulso (WALKER; GATHRIGHT, 1992; PUJOL; CARLES; PÉREZ, 2014; HARRISON; VALAVANIS, 2016).

Assim, o presente trabalho visa evidenciar o papel da Física Computacional como ferramenta alternativa para o ensino de sistemas quânticos dentro do contexto da Física Moderna. Para tanto, optou-se pelo problema da barreira de potencial retangular. Esse simples e idealizado modelo é comumente apresentado na literatura didática de Introdução a Mecânica Quântica em diversos cursos superiores pelo mundo. Além disso, é um dos sistemas básicos para o entendimento elementar dos fenômenos físicos presentes em dispositivos semicondutores. O processo de resolução comumente empregado consiste na modelagem matemática, obtendo uma solução do tipo analítica, prosseguindo da aplicação de métodos numéricos apropriados para a obtenção de soluções aproximativas que satisfaçam o entendimento físico do respectivo sistema. Nessa abordagem, usa-se a equação de Schrödinger e as condições de contorno apropriadas para a função de onda e derivadas para determinar processos de transmissão da função de onda através da barreira. Por outro lado, de forma mais simples, e ainda sim sofisticada, pode-se utilizar a MT para a obtenção das propriedades do sistema de barreiras de potenciais. Dessa forma, a presente pesquisa busca apresentar a modelagem de barreiras de potencial do tipo simples, dupla e para N barreiras, de forma que poderemos observar a probabilidade de transmissão e o efeito de ressonância. Por fim, ainda usando MT, podemos investigar as propriedades eletrônicas em estruturas de super-redes, ou seja, quando tomamos $N \rightarrow \infty$. O método ainda prossegue pela construção do algoritmo apresentado de forma sistemática e didática.

A implementação do algoritmo será realizada na linguagem Python, pois, esta pesquisa pondera pelas suas características de alta performance, ou seja, ela é capaz de executar tarefas complexas de forma eficiente e rápida, dentre outras vantagens. No quesito do seu uso na modelagem científica, a quantidade de bibliotecas específicas para esse tipo de modelagem, suas possíveis otimizações de sentenças de base C e $C++$, faz do Python a melhor opção frente a proposta dessa pesquisa. No quesito curva de

aprendizado, ela também se destaca à medida que consegue suprir a necessidade de fluidez em aprendizado. Além disso, a linguagem Python possui uma boa desenvoltura para processos de introdução ao desenvolvimento de *softwares*, que é uma tarefa cada vez mais presente nos dias atuais para diversos fins (GEZERLIS, 2020; MORUZZI, 2020; RAMALHO, 2022).

Por fim, o presente trabalho se estrutura como segue. Primeiramente, no Capítulo 2, fazemos uma reflexão acerca do ensino da Mecânica Quântica Básica através do estudo de sistemas de potenciais periódicos sobe a égide da Física Computacional, relacionando seus aspectos pedagógicos e didáticos na formação de professores de Física. No Capítulo 3, seguimos por apresentar a modelagem de uma barreira retangular simples seguindo para duas barreiras simétricas e estendendo para N barreiras com o desenvolvimento da MT. A metodologia é trazida no Capítulo 4, onde abordamos de forma sequencial e didática a implementação do algoritmo baseado na linguagem de programação *Python*. Os resultados para os sistemas estudados, como aplicação dos algoritmos produzidos, são apresentados e discutidos no Capítulo 5. Finalmente, fazemos um breve resumo e destacamos algumas considerações finais no Capítulo 6.

2 FÍSICA E TECNOLOGIA: OS DESAFIOS DO ENSINO DE FÍSICA SOBRE O MUNDO MODERNO

O currículo regular de Física trata de conceitos que foram elaborados principalmente durante os séculos XVII e XVIII. Isso entra em conflito quando projeta-se um ensino voltado para um aprendizagem significativa e que, ao mesmo tempo, introduza conhecimento suficientemente oportuno para o aluno lidar com seus desejos profissionais (KUENZER, 2011).

Essa mudança de paradigma, de uma visão tradicional de transmissão/recepção para outra de construção de saberes, conduz-nos à utilização de uma nova perspectiva de atuação na prática docente. A recente reforma do Ensino Médio trouxe uma perspectiva objetiva a respeito do papel do docente no plano educacional no Brasil, e consequentemente, de sua formação. Essa nova visão evidencia-se ainda mais quando contempla-se as competências elencadas na nova legislação, que procura alargar os objetivos da educação nacional. Compete então ao docente, nesse novo contexto, tratar o ensino necessariamente de forma contextualizada, a fim de preparar os estudantes a fazer julgamentos, tomar iniciativas, elaborar argumentos e apresentar proposições alternativas, bem como fazer uso criterioso de diversas tecnologias e seu respectivo funcionamento (BRASIL, 2018).

Martins (2003) argumenta que compreender fenômenos técnicos, evidenciados nos artefatos que impregnam a vida diária, tornou-se um imperativo das sociedades modernas pelo que uma cultura científica inclui e deve pressupor uma cultura tecnológica para todos. Desta forma, Ciência e a Tecnologia são entendidas como partes integrantes da cultura, pelo que o conhecimento científico-tecnológico tem um valor sócio-cultural intrínseco capaz de proporcionar, a quem dele for detentor, saberes e competências valiosas para o exercício pleno da cidadania (MARTINS, 2003; CHIQUITO et al., 2022).

Grande parte dos avanços da tecnologia moderna, advém da aplicação da Física Moderna à Eletrônica. Além disso, a utilização de materiais semicondutores, na fabricação de elementos e dispositivos eletrônicos, significou um dos maiores avanços no mundo da Eletrônica em geral e da Ciência da Computação em particular. Como expoente desse avanço, temos a invenção do circuito integrado e o desenvolvimento de heteroestruturas semicondutoras usadas em diferentes ramos do setor de comunicações (KILBY, 1959; ALFEROV, 2001).

Desta forma, as descobertas supracitadas demonstram que diferentes famílias de semicondutores são a base dos dispositivos eletrônicos que regem, hoje, a operação de telefonia móvel, calculadoras, consoles de jogos, televisões, computadores, relógios digitais, etc. Em consequência disso, o ensino da Física de Semicondutores apresenta-se como o quadro de conteúdos obrigatórios para a integração da Física-Eletrônica no currículo de

Ciências (Física e Química) na formação docente. A sua inclusão proporciona, defende essa pesquisa, aos estudantes da graduação uma visão mais profunda e completa da Eletrônica, bem como a capacidade de análise crítica e compreensão dos aspectos relacionados a esta área, que fazem parte do seu cotidiano (CARMONA; BARBERO et al., 2005; BONILLA, 2022).

Portanto, a Física de Semicondutores deve ser entendida como uma parte essencial dentro da didática e epistemologia da Eletrônica. Esse fato justifica o uso da Física de Semicondutores como ferramenta na formação de professores. Destarte, a Física de Semicondutores é uma área composta por leis e princípios relacionados à Física do Estado Sólido, Mecânica Quântica, Mecânica Estatística, Eletromagnetismo, etc. (KITTEL, 2006). Portanto, ela evolui e se desenvolve ao ritmo dos diferentes campos da Física que a compõem. Assim, não é difícil decidir que conteúdos devem ser tratados numa primeira introdução a esta temática ao longo da graduação em Física. Uma das questões essenciais, ao fazer uma seleção de conteúdos de Física de Semicondutores para o Ensino Médio, é a sua inteira ligação com a natureza e funcionamento de heteroestruturas semicondutoras. Elas são apresentadas nos livros textos de introdução à Mecânica Quântica como uma aplicação de sistemas quânticos básicos que as descrevem por meio de barreiras ou poços de potencial. Comumente nos livros texto, essa tratativa acaba por enveredar para uma visão mais abstrata dos sistemas Físicos supracitados, e dessa maneira, contemplando apenas aspectos matemáticos de difícil compreensão imediata.

Doravante, defende-se na presente pesquisa, que a realização de qualquer abordagem em sala de aula, devem ser levadas em consideração as tendências atuais da didática moderna, que estabelecem o construtivismo como o modelo de ensino/aprendizagem mais adequado. Finalmente, e de forma a reforçar o ensino das noções de Física de Semicondutores, será necessário estabelecer uma articulação adequada com a Área de Tecnologia Secundária. Em uma perspectiva de prática científica, intermediada pela existência do Novo Ensino Médio, a amalgama entre a Física dos Semicondutores e Física Computacional, consegue projetar um cenário de Educação Científica de teor profissionalizante. A medida que o aluno estuda a Física Moderna, precisamente a Física Básica dos Semicondutores, produz para si experiência de programação em quantidade suficiente para uma perspectiva maior de profissionalidade (FELIPE et al., 2014; OLIVEIRA et al., 2022).

Ademais, alguns estudos revelaram a dificuldade que os estudantes têm em explicar a estrutura e o comportamento da matéria. Essas dificuldades acentua-se quando os mesmos precisam justificar tal comportamento de uma perspectiva atômica. A busca por sanar tais dificuldades é essencial para se construir, nos professores em formação, uma abordagem didática efetiva, pois um entendimento adequado da condução elétrica em materiais exige que os estudantes saibam como os elétrons se distribuem no interior dos

átomos, e quais são as características fundamentais das ligações químicas (MÜLLER, 2022; ALMEIDA; LIMA; DAVID, 2022).

Conforme isso, cabe agora indagarmos em quais circunstâncias e em qual patamar está a formação de professores frente a atual problemática já considerada. Quais ferramentas podem proporcionar ao professor de Física um aparato suficientemente apto para construir uma educação de mais qualidade, moderna e, dentro de uma perspectiva profissionalizante?

A formação docente é um processo complexo que permeia uma série de etapas (metodológicas, sociais, filosóficas, etc.) que ponderam entre si, de modo a formarem um caldeirão de difícil simplificação. Dessa maneira, nos concentraremos a seguir numa perspectiva intrínseca ao uso da tecnologia como um ferramental viável para auxílio na formação do docente em Física. Com isso, espera-se que esses novos aprendizados possam ser úteis na sua atuação profissional, seja no ensino básico, seja no ensino superior.

2.1 FORMAÇÃO DE PROFESSORES FRENTE ÀS TECNOLOGIAS

O processo de formação do docente é parte fundamental da estrutura educacional do Brasil. Não à toa, apesar dos diversos reveses em sua história, esse tema sempre esteve nos holofotes de educadores e políticos nacionais (SAVIANI, 2011). Destarte, como discutido anteriormente, o contexto tecnológico atual põe mais elementos na discussão quando projetada para a modernidade. Então, quais ferramentas se adéquam a esse determinado contexto? Como podemos engajar estudantes diante de um mundo de facilidades e abarrotado de informação? A literatura tem apontado em direção ao Pensamento Computacional (PC) como instrumento viável para formação e prática docente.

O termo PC tornou-se amplamente utilizado como um termo popular durante a década de 1980, referindo-se a uma coleção de ideias (formas de pensar) que as pessoas nas disciplinas de computação adquirem por meio de seu trabalho em projetar programas, *software* e cálculos executados pelo *hardware* do computador (KHINE, 2018). Desde então, entende-se que o PC é uma habilidade fundamental que complementa a leitura, a escrita, aritmética e mais uma gama de aptidões universalmente aplicáveis.

Contudo, como aponta Caskurlu et al. (2021), os professores precisam entender o que é PC, o que ele envolve e como as práticas podem estar relacionadas às suas disciplinas. Também é necessário que os professores busquem construir competências, a fim de elaborar estratégias de ensino para orientar e envolver os estudantes na obtenção de habilidades de pensamento disciplinar e computacional (BORDINI et al., 2017; CONCHETI; REIS; LYRA, 2022). Tendo em vista as mudanças profundas que a educação no Brasil sofreu em anos recentes, a implementação de uma Base Nacional Comum Curricular (BNCC) por exemplo, exige-se que o docente possa contribuir para o futuro do educando para além do

conhecimento de sala de aula.

Como já discutido, o ensino de Física no Brasil tende a se mostrar fora dos parâmetros quando comparado com o mundo contemporâneo, por não possuir em seu currículo partes essenciais da tecnologia (MOREIRA, 2018). Por outro lado, esse desafio é somado ao novo contexto educacional brasileiro quando a nova legislação impõe um caráter “*self empreendedor*” para a educação a nível médio. Visto isso, fica mais claro a necessidade de aprofundamento na formação de professores no uso e entendimento da tecnologia.

Apresentaremos as seguir paradigmas, dentro de uma perspectiva moderna, do estudo de modelos de barreiras de potenciais retangulares. Esse modelo pode servir, por exemplo, de introdução ao estudo da Física de Semicondutores, pois traduz a Física básica por trás do funcionamento de estruturas semicondutoras. Para tanto, faremos uso de modelagem computacional na linguagem *Python*, que por si mesma apresenta um gama de possibilidades de uso no Ensino de Física. Dessa forma, pretende-se agregar possibilidade de acréscimos na formação de professores frente a realidade do ensino de ciências da natureza. Usaremos o Método de Matriz de Transferência no estudo de barreiras retangulares. Uma variedade de sistemas quânticos unidimensionais é estudada usando usando esse tipo de abordagem. Vale salientar que para o uso desse método apenas duas matrizes são necessárias: uma para propagar uma função de onda em uma região de potencial constante, a outra para conectar funções de onda em uma descontinuidade no potencial (WALKER; GATHRIGHT, 1992; KITTEL, 2006).

2.2 COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA: PORQUE UTILIZAR A LINGUAGEM *PYTHON*

Python é uma linguagem de programação que vem sendo empregada na construção de soluções para os mais diversos fins educacionais, comerciais e científicos, plataformas *web*, *desktops* e, mais recentemente, dispositivos móveis. A linguagem *Python* é definida como uma linguagem de alta performance. Ao mesmo tempo, ela consegue ser uma linguagem de fácil aprendizado, expressiva, concisa e muito produtiva; por isso, sua adoção tem crescido bastante nos últimos anos pelos mais variados perfis de profissionais no meio científico e acadêmico, tanto para desenvolvimento de ferramentas quanto para ensino de algoritmos e introdução à programação (MORUZZI, 2020).

Esse destaque positivo da *Python* também advém do seu caráter *open source* e multiplataforma. Ela é compatível com os principais sistemas operacionais, como: Linux, OSX, Windows, BSDs etc. Além disso, conta com uma vasta biblioteca padrão e documentação que possibilitam que muitas coisas sejam feitas sem dependências adicionais. Desde sua criação em 1989, pelo matemático e cientista da computação holandês Guido van Rossum, a *Python* demonstrou uma grande viabilidade em aplicações. Elas vão desde da

implementação em *Kernels*, como é o caso dos sistemas de base Linux, até implementações para *web designer*, mesclado a outras linguagens como *Java Script*, por exemplo (MORUZZI, 2020).

Assim, a *Python* se destaca frente às plataformas/linguagens comumente utilizadas para modelagem, como *Matlab* e o *Mathematica*, primeiramente, pelo financeiro, pois não é necessário uma licença para utilizar ou para ter acesso a uma grande quantidade de códigos exemplos. Também não há a necessidade de restrição a uma plataforma única, já que há disponíveis várias destas com suporte gratuito. Embora seja uma linguagem excelente para computação científica, não é apenas uma linguagem de computação científica. A *Python* tem a vantagem de ser uma linguagem de programação de uso geral. Logo, o seu aprendizado, mesmo que seja introdutório a orientação de objetos, terá uma grande possibilidade de aprofundamento em outras formas de implementação da *Python*, abrangendo dessa forma possíveis interesses de trabalho.

Como alguns dos exemplos de aplicação em diversas áreas que a linguagem *Python* atua, podemos citar a construção de um sistema de sincronização de arquivos (*Dropbox*), um serviço de compartilhamento de fotos (*Instagram*), um aplicativo de modelagem e edição de vídeo 3D (*Blender*), uma plataforma de hospedagem de vídeo (*YouTube*) dentre outros. No campo científico, em uma aplicação mais recente e inteiramente revolucionária, foi usada na maioria dos componentes do projeto LIGO (*Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory*) que foi fundamental para detectar ondas gravitacionais e comprovar previsões teóricas da Teoria da Relatividade Geral. Por fim, existe uma coleção útil de tutoriais disponíveis online com acesso livre (SAABITH; FAREEZ; VINOTHRAJ, 2019; MACLEOD et al., 2021).

3 A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER E SISTEMAS DE BARREIRAS

Em uma série de artigos publicados em 1926, o físico austríaco Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887-1961) desenvolveu sua pesquisa sobre a Mecânica das Ondas. A ideia preliminar era que o movimento de um objeto microscópico deveria ser representado pelo processo análogo ao de uma onda em determinado espaço e não pelo movimento de pontos (partículas) nesse mesmo espaço. Portanto, seguindo esta ideia, o movimento de um elétron é descrito por meio de uma “função de onda”, que aqui é denotado por $\Psi(\mathbf{r}, t)$, definida em todo o espaço e satisfazendo uma nova equação de evolução (TETA, 2018).

Como é sabido, a equação de Schrödinger é parte fundamental da Mecânica Quântica e pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (3.1)$$

onde o termo $\hat{H}$ é o operador hamiltoniano do sistema que pode ser visto pela soma de um termo cinético e outro potencial, ou seja,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

onde $\hat{p} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right)$ é o operador momento escrito em coordenadas cartesianas, com $\hbar$ sendo a constante de Planck h dividida por 2π , m a massa da partícula e $\mathbf{r} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z$ o vetor no espaço. Usando a Eq. (3.2), a Eq. (3.1) pode ser escrita como

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.3)$$

A Eq. (3.3) é uma Equação Diferencial Parcial de ordem 2, onde a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ depende da posição $\mathbf{r}$ e do tempo t . Para simplificar a análise e tornar o processo mais didático, vamos apresentar aqui uma solução dessa equação no caso unidimensional, sem prejuízos na compreensão de conceitos físicos. Portanto, considerando a direção x , a Eq. (3.3) será expressa da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (3.4)$$

Como estamos considerando um potencial $V(x)$ independente do tempo, somos levados a propor uma solução da forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\chi(t), \quad (3.5)$$

onde a solução geral para o sistema pode ser separada em uma parte espacial, $\psi(x)$, e uma parte temporal, representada por $\chi(t)$.

Substituindo Eq. (3.5) na (3.4), obtemos

$$-\chi(t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \chi(t)\psi(x)V(x) = i\hbar\psi(x) \frac{d\chi(t)}{dt}. \quad (3.6)$$

Dividindo ambos os lados da equação acima pelo produto $\psi(x)\chi(t)$, encontramos

$$-\frac{1}{\psi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = \frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt}. \quad (3.7)$$

Podemos ver que essa equação é uma igualdade entre funções que dependem apenas de t de um lado (direto) e da posição x do outro lado (esquerdo). Essa igualdade só é possível se de fato as funções forem iguais. De forma intencional, igualamos os dois lados à uma constante E , que representará a energia do sistema. Assim, a parte temporal será dada por

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = E \quad \Rightarrow \quad \frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = -i \frac{E}{\hbar} dt, \quad (3.8)$$

onde pode ser facilmente integrada, resultando em

$$\chi(t) = \chi_0 e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \quad (3.9)$$

com χ_0 sendo uma constante que depende das condições iniciais. Da mesma forma, a parte espacial deve satisfazer a seguinte equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.10)$$

A Eq. (3.10) é a equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT), cuja as suas soluções $\psi(x)$ são denominadas autoestados.

A solução total, suprimindo a constante χ_0 , pode ser escrita como

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \quad (3.11)$$

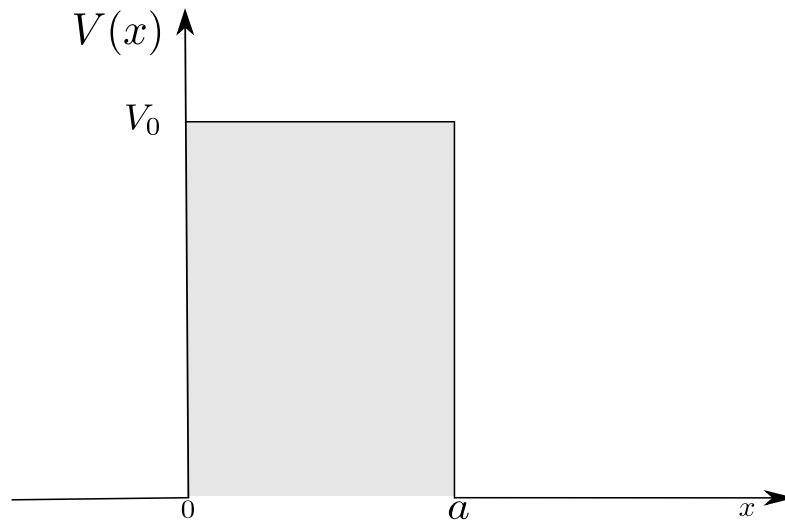
à qual podemos nos referir como uma solução estacionária da equação de Schrödinger. Um estado estacionário é um estado no qual a energia é bem definida, obedecendo a relação de Planck-Einstein, $E = \hbar\omega$, com ω sendo a frequência angular (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2020).

Como forma de aplicação direta da Eq. (3.10), os livros comumente utilizados nos cursos superiores de Física tendem a apresentar sistemas simples tais como barreiras de potencial retangular, poços de potencial finito e infinito. Nas próximas seções iremos focar em aplicar a (ESIT) para estudar barreiras de potencial retangular, partindo do caso mais simples de uma única barreiras para casos mais gerais de N barreiras aplicando a MT. Além disso, dentro desse contexto, discutiremos de forma breve o limite para super-redes com $N \rightarrow \infty$ e faremos um paralelo com uma rede cristalina, discutindo o surgimento de bandas de energia que é um modelo indispensável para um introdução dos fenômenos que surgem nas interações microscópicas em sistemas quantizados.

3.1 BARREIRA DE POTENCIAL SIMPLES

Talvez o problema mais simples da mecânica quântica seja a propagação unidimensional de um elétron na presença de potenciais que variam sobre pequenas distâncias. Iremos inicialmente considerar o problema unidimensional com um potencial do tipo mostrado na Fig. 1, onde o eixo x é dividido em certas regiões de potencial contante. Na interface entre duas regiões distintas temos uma mudança abrupta, ou seja, uma descontinuidade. Na verdade, tal função não pode representar um potencial físico na prática, que deve ser contínuo, mas podemos considerar um potencial real por um potencial do tipo retangular desde que a variação de $V(x)$ seja muito menor quando comparada a outras distâncias envolvidas no problema (em particular, o comprimento de onda associado à partícula).

Figura 1 – Barreira de potencial retangular simples, onde V_0 é a altura da barreira e a é a largura.



Fonte: Elaborado pelo Autor

O movimento de uma partícula quântica de massa m na presença desse potencial é governado pela Eq. (3.10). A interação das partículas com esse tipo de potencial, dentro do contexto da mecânica quântica, faz surgir fenômenos quânticos que não são explicados pela mecânica clássica, tal como o tunelamento quântico, em que partículas podem transpor um estado de energia classicamente proibido.

A natureza peculiar do tunelamento da mecânica quântica pode ser ilustrada usando uma analogia clássica e imaginando o quão assustador alguém se sentiria ao chutar uma bola na direção de uma parede de tijolos, e ela a atravessasse. No entanto, e o mais estranho que isso possa aparecer, é exatamente isso que acontece com alguns elétrons (partículas) quando eles encontram uma barreira de potencial dentro de um cristal (KITTEL, 2006).

O tunelamento é um fenômeno cotidiano que também ocorre em uma variedade de dispositivos semicondutores (diodos, transistores, etc), alguns dos quais aparecem

em produtos eletrônicos de consumo usualmente em nosso dia-à-dia. Uma maneira de quantificar a proporção de elétrons que atravessam uma barreira é em termos do coeficiente de transmissão, que é definido como a probabilidade de que qualquer elétron único que colida com uma estrutura de barreira crie um túnel e contribua para o fluxo de corrente através da barreira.

Ferry e Goodnick (1997) realizaram uma análise aprofundada do coeficiente de transmissão para uma estrutura de barreira única. Para obter os mesmos resultados, em que haverá uma massa efetiva constante através da barreira retangular, utilizamos a Eq. (3.10) para cada uma das regiões, levando em consideração a presença ou não de um determinado potencial constante para uma largura a e altura V_0 na energia E . Esse processo é o método mais comum para essa configuração.

Para tanto, consideraremos as seguintes condições para a existência do potencial nos respectivos intervalos,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0, & \text{região (I)} \\ V_0, & \text{se } 0 \leq x \leq a, & \text{região (II)} \\ 0, & \text{se } x > a, & \text{região (III)} \end{cases}$$

A Eq. (3.10) para as regiões (I) e (III), onde $V(x) = 0$, é escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

ou ainda

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) = 0,$$

com $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, o que resulta em soluções,

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad (3.12)$$

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \quad (3.13)$$

onde A_i e B_i são constantes complexas. Portanto, a partícula pode existir como uma onda que se propaga livremente em ambos os lados fora da barreira.

Por sua vez, na região (II), onde o potencial tem valor constante V_0 , a Eq. (3.10) será dada por

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \rho^2\psi(x) = 0,$$

onde temos agora a constante $\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$. Logo, a solução para a região (II) é

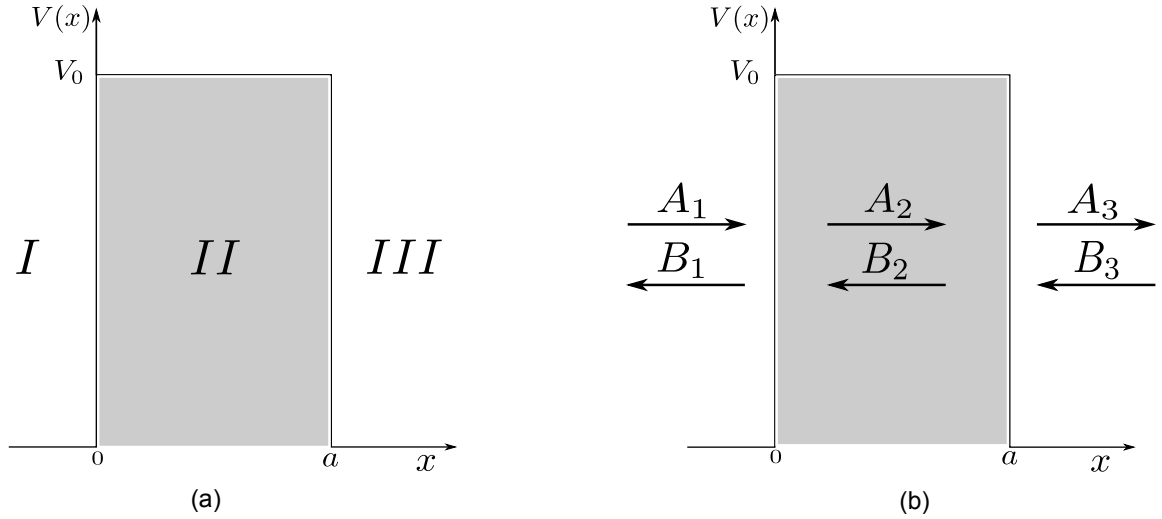
$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x}. \quad (3.14)$$

Assim, a função de onda para cada região será dada pelas soluções encontradas nas Eqs. (3.12), (3.13) e (3.14), ou seja,

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & \text{região (I)} \\ A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x}, & \text{região (II)} \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & \text{região (III)} \end{cases}.$$

O sentido físico dos coeficientes A_i e B_i fora da barreira podem ser associado aos coeficientes de incidência (A_1), de reflexão (B_1) e transmissão (A_3), como pode ser visto na Figura 2.

Figura 2 – Barreira de potencial retangular simples, onde V_0 é a altura da barreira e a é a largura. Na parte (a) observa-se as respectivas regiões, enquanto em (b) vemos os coeficientes de incidências (A_i), de reflexão (B_i) para cada região.



Fonte: Elaborado pelo Autor

Como podemos ver, temos seis coeficientes desconhecidos para determinar e, usando as propriedades de continuidade das funções de onda e das derivadas em ambos os lados, teremos apenas quatro equações. Uma quinta condição pode ser tomada com a normalização das funções de ondas que chegam de um lado para outro. Para nossos propósitos, que é determinar a transmissão da esquerda para a direita, iremos considerar ondas se propagando nesse sentido e, portanto, $A_1 = 1$ e $B_3 = 0$.

3.1.1 Transmissão via substituição de coeficientes

Aplicando as condições de continuidade da função de onda e suas derivadas primeiras para a interface da esquerda da barreira (posição $x = 0$),

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), \\ \psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0), \end{aligned}$$

e, da mesma forma, para a interface do lado direito (posição $x = a$),

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a),$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a),$$

podemos escrever que,

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (3.15)$$

$$ik(A_1 - B_1) = \rho(A_2 - B_2) \quad (3.16)$$

$$A_2 e^{\rho a} + B_2 e^{-\rho a} = A_3 e^{ika} \quad (3.17)$$

$$\rho(A_2 e^{\rho a} - B_2 e^{-\rho a}) = A_3 i k e^{ika}. \quad (3.18)$$

Para uma simplificação de notação, e considerando que a partícula incide na barreira no sentido esquerda para a direita, vamos substituir $A_1 = 1$, $B_1 = r$ e $A_3 = t$. Assim, a partir das Eqs. (3.15) e (3.16), temos

$$\begin{cases} 1 + r = A_2 + B_2 \\ 1 - r = \frac{\rho}{ik}(A_2 - B_2) \end{cases} \quad (3.19)$$

Resolvendo o sistema (3.19) para A_2 e B_2 , obtemos que

$$A_2 = \frac{1}{2}(1 + r) + \frac{ik}{2\rho}(1 - r), \quad (3.20)$$

$$B_2 = \frac{1}{2}(1 + r) - \frac{ik}{2\rho}(1 - r), \quad (3.21)$$

Agora, com as Eqs. (3.17) e (3.18), encontramos que

$$\begin{cases} A_2 e^{\rho a} + B_2 e^{-\rho a} = t e^{ika} \\ A_2 e^{\rho a} - B_2 e^{-\rho a} = \frac{ik}{\rho} t e^{ika}. \end{cases} \quad (3.22)$$

Somando membro a membro, teremos uma equação com o coeficiente A_2 apenas, ou seja,

$$\begin{aligned} 2A_2 e^{\rho a} &= \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right) t e^{ika} \\ 2A_2 &= \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right) t e^{(ik-\rho)a}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Usando a Eq. (3.20) e isolando r , teremos

$$\begin{aligned} 2 \left[\frac{1}{2}(1 + r) + \frac{ik}{2\rho}(1 - r) \right] &= \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right) t e^{(ik-\rho)a} \\ \rho(1 + r) + ik(1 - r) &= (\rho + ik) t e^{(ik-\rho)a} \\ 1 + \left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right) r &= t e^{(ik-\rho)a} \\ r &= \left(\frac{\rho + ik}{\rho - ik} \right) [t e^{(ik-\rho)a} - 1] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Repetindo o processo, contudo, subtraindo os termos de (3.22) para obter B_2 ,

$$\begin{aligned} 2B_2e^{-\rho a} &= \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right) te^{ika}, \\ 2B_2 &= \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right) te^{(ik+\rho)a}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

e agora, aplicamos a Eq. (3.21) e isolando r , teremos

$$\begin{aligned} 2 \left[\frac{1}{2}(1+r) - \frac{ik}{2\rho}(1-r) \right] &= \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right) te^{(ik+\rho)a}, \\ \rho(1+r) - ik(1-r) &= (\rho - ik) te^{(ik+\rho)a}, \\ 1 + \left(\frac{\rho + ik}{\rho - ik}\right) r &= te^{(ik+\rho)a}, \\ r &= \left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right) [te^{(ik+\rho)a} - 1]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Comparando as Eqs. (3.24) e (3.26), temos que

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho + ik}{\rho - ik}\right) [te^{(ik-\rho)a} - 1] &= \left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right) [te^{(ik+\rho)a} - 1], \\ (\rho + ik)^2 [te^{(ik-\rho)a} - 1] &= (\rho - ik)^2 [te^{(ik+\rho)a} - 1], \\ te^{(ik-\rho)a} (\rho + ik)^2 - (\rho + ik)^2 &= te^{(ik+\rho)a} (\rho - ik)^2 - (\rho - ik)^2, \\ te^{(ik-\rho)a} (\rho + ik)^2 - te^{(ik+\rho)a} (\rho - ik)^2 &= 4\rho ik, \end{aligned}$$

e isolando t , obtemos,

$$\begin{aligned} t &= \frac{4i\rho k}{e^{(ik-\rho)a} (\rho + ik)^2 - e^{(ik+\rho)a} (\rho - ik)^2}, \\ t &= \frac{4i\rho k e^{(\rho-ik)a}}{(\rho + ik)^2 - (\rho - ik)^2 e^{2\rho a}}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Dessa maneira, a probabilidade de transmissão T , dada pelo quadrado do módulo de t , é dada por

$$T = tt^* = |t|^2 = \frac{4i\rho k e^{(\rho-ik)a}}{(\rho + ik)^2 - (\rho - ik)^2 e^{2\rho a}} \cdot \frac{-4i\rho k e^{(\rho-ik)a}}{(\rho - ik)^2 - (\rho + ik)^2 e^{2\rho a}}.$$

Efetuando os quadrados na Eq. (3.28) e a manipulando de forma adequada, encontramos

$$\begin{aligned} T &= \frac{16k^2 \rho^2 e^{2\rho a}}{(k^2 - \rho^2)(1 - e^{2\rho a})^2 + 4k^2 \rho^2 (1 + e^{2\rho a})} \\ T &= \frac{16k^2 \rho^2}{(k^2 - \rho^2)(e^{\rho a} - e^{-\rho a})^2 + 4k^2 \rho^2 (e^{\rho a} + e^{-\rho a})^2} \end{aligned} \quad (3.28)$$

em que os termos $e^{\rho a} - e^{-\rho a} = 2 \sinh(\rho a)$ e $e^{\rho a} + e^{-\rho a} = 2 \cosh(\rho a)$. Assim a Eq. (3.28) fica

$$\begin{aligned} T &= \frac{16k^2\rho^2}{4(k^2 - \rho^2) \sinh^2(\rho a) + 16k^2\rho^2 \cosh^2(\rho a)}, \\ T &= \frac{16k^2\rho^2}{4(k^4 - 2k^2\rho^2 + \rho^4) \sinh^2(\rho a) + 16k^2\rho^2[\sinh^2(\rho a) - 1]}, \\ T &= \frac{16k^2\rho^2}{4(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a) + 16k^2\rho^2}, \end{aligned}$$

e por fim, obtemos,

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + \rho^2)^2}{4k^2\rho^2} \sinh^2(\rho a)}, \quad \text{para } E < V_0. \quad (3.29)$$

A Eq. (3.29) traduz a probabilidade de transmissão da partícula através da barreira de potencial com energia $E < V_0$. Para valores de energia E maiores que a altura da barreira V_0 , fazemos a seguinte substituição $\rho \rightarrow i\rho'$, e portanto

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - \rho'^2)^2}{4k^2\rho'^2} \sin^2(\rho' a)}, \quad \text{para } E > V_0, \quad (3.30)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ e $\rho' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$.

Como a transmissão e a reflexão são as únicas possibilidades para as partículas que incidem em uma barreira, podemos determinar a probabilidade de reflexão $R = |r|^2$ a partir da seguinte relação

$$T + R = 1.$$

Essa equação está relacionada à conservação do fluxo de probabilidade, ou seja, o fluxo de probabilidade incidente se desdobra em um fluxo transmitido e outro refletido ao atingir a barreira de potencial.

Vamos nos restringir apenas à probabilidade de transmissão da partícula. Assim, reescrevendo as Eqs. (3.29) e (3.30) em função da energia E , teremos

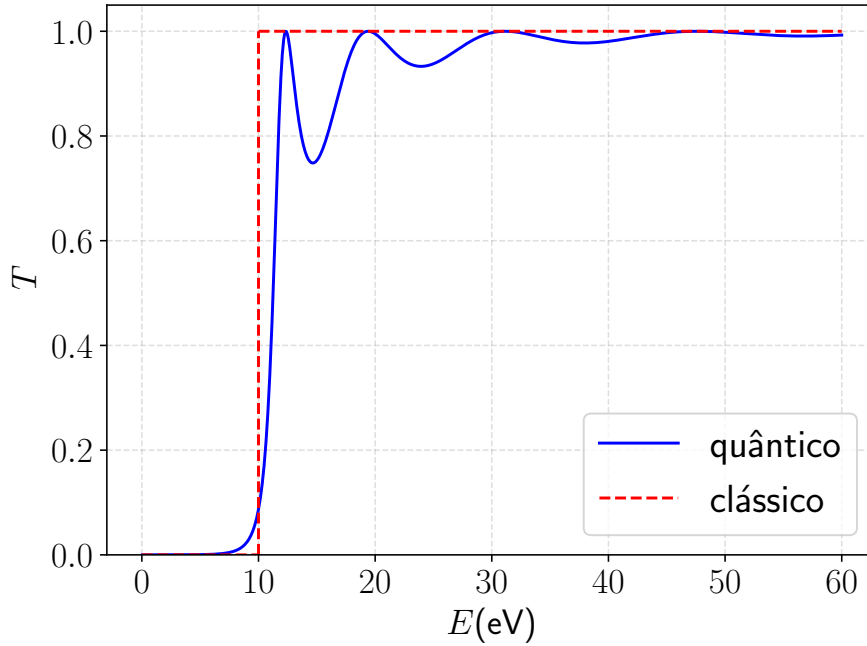
$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left[\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right]}, \quad \text{para } E < V_0 \quad (3.31)$$

e

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left[\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \right]}, \quad \text{para } E > V_0 \quad (3.32)$$

O gráfico do coeficiente de transmissão em termos da energia, a partir das Eqs. (3.31) e (3.32), pode ser visto na Fig. 3. Nesse gráfico, representamos o resultado clássico

Figura 3 – Coeficiente de transmissão $T(E)$ em função da energia E para um potencial retangular de altura de $V_0 = 10$ eV e largura $a = 2$ nm. A curva em vermelho tracejado é o resultado clássico enquanto a curva azul contínua é o resultado quântico.



Fonte: Elaborado pelo Autor

através de uma linha tracejada em vermelho e o resultado quântico pela curva sólida em azul.

Em termos de Mecânica Clássica, $T = 0$ para $E < V_0$ e $T = 1$ para $E > V_0$. Por outro lado, em termos Mecânica Quântica, podemos ver que a partícula tunela, ou seja, tem um parcela que penetra a barreira para $E < V_0$, apesar da probabilidade de transmissão ser pequena. Se fizermos $\rho a = [\sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}]a \gg 1$, a Eq. (3.31) pode ser aproximadamente expandida, resultando em

$$T(E) \approx \frac{16E}{V_0} e^{-2\rho a}. \quad (3.33)$$

Nessa situação, o coeficiente de transmissão apresenta um decaimento exponencial com a largura da barreira. Isso demonstra que uma partícula pode atravessar uma barreira de potencial que seria completamente intransponível do ponto de vista da Mecânica Clássica [ver Fig. 3]. Esse fenômeno é conhecido como efeito túnel e aparece com frequência em vários ramos da Física.

Para o caso em que $E > V_0$, a Eq. (3.32) nos mostra que o coeficiente de transmissão tem um comportamento oscilatório e é unitário somente quando $\sin(\rho' a) = 0$, e isso ocorre quando $\rho' a = n\pi$ (n inteiro), ou seja, existe um número exato de meio comprimento de onda na barreira. A energia nesses pontos de ressonâncias é dada por

$$E = \frac{(n\hbar\pi)^2}{2ma^2} + V_0. \quad (3.34)$$

Por fim, no caso particular, quando a energia se iguala ao topo da barreira, $E = V_0$, a transmissão é dada por

$$T(E = V_0) = \left[1 + \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2} \right]^{-1}. \quad (3.35)$$

O termo adimensional $ma^2V_0/2\hbar^2$ que surge na equação acima está relacionado à opacidade da barreira, ou seja, quando maior esse valor, menor será o fluxo de probabilidade que atravessa a barreira.

Assim, analisamos como se comporta uma partícula quântica que incide em uma barreira de potencial, destacando algumas propriedades e limites. Essa é a forma que é apresentado na maioria dos textos básicos de Introdução à Mecânica Quântica ou Física Moderna (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2020; TETA, 2018; GRIFFITHS; SCHROETER, 2018). Uma extensão analítica para um sistema de múltiplas barreiras para simular, por exemplo, heteroestruturas constituídas de múltiplos materiais semicondutores pode ser extremamente trabalhoso e muito complexo. Uma forma alternativa, que será o foco do nosso trabalho, é com o uso do método da matriz de transferência, que pode ser vista como um produto de matrizes para produzir o coeficiente de transmissão para uma sequência arbitrária de barreiras e poços de potencial. Iremos analisar nas próximas seções aplicações particulares para o sistema de barreira dupla, destacando o tunelamento ressonante, e o caso onde temos um número grande de barreiras regularmente espaçadas de forma sequencial, conhecido como super-redes.

3.1.2 Transmissão via relações matriciais

As relações entre os coeficientes das regiões de entrada e saída de uma barreira (ou um sistema periódico de barreiras) podem ser relacionadas através de matrizes. Nessa seção iremos concentrar a atenção nessas equações matriciais, que são raramente discutidas em textos básicos de Mecânica Quântica, para obter os mesmos resultados anteriores.

Resgatando conceitos vistos anteriormente para o caso da barreira simples, pode-se aplicar a Eq. (3.3) nas regiões fora e dentro da barreira de potencial para obter as funções de onda para a região correspondente. Tomando a região externa à barreira, $V = 0$, e interna, $V \neq 0$, as condições de contorno das Eqs. (3.15) e (3.16) podem ser organizadas em termos de relações matriciais, ou seja,

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik(A_1 - B_1) &= \rho(A_2 - B_2), \end{aligned}$$

podem ser expressas como

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \rho & -\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Simplificando a notação, vamos definir M_1 a matriz (2×2) do lado esquerdo da Eq. (3.36) e M_2 a do lado direito, no interior da barreira. Assim, temos

$$M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

multiplicando ambos os lados da Eq. (3.37) pela matriz inversa M_1^{-1} e usando a propriedade matricial $M_1^{-1} M_1 = I$ (I sendo a matriz identidade 2×2), teremos

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_1^{-1} M_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Respeitando as regras de multiplicação de matrizes, obtemos

$$\mathbf{d}_{12} \equiv M_1^{-1} M_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{ik}{\rho} & 1 - \frac{ik}{\rho} \\ 1 - \frac{ik}{\rho} & 1 + \frac{ik}{\rho} \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

onde definimos $\mathbf{d}_{12}$ como a matriz de salto, também conhecida por matriz de descontinuidade. Essa matriz desempenha o papel de conectar as regiões de potencial $V_1 = 0$ e $V_2 = V_0$.

De forma análoga, para a interface do lado direito, teremos

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_2^{-1} M_1 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

onde

$$\mathbf{d}_{21} \equiv M_2^{-1} M_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\rho}{ik} & 1 - \frac{\rho}{ik} \\ 1 - \frac{\rho}{ik} & 1 + \frac{\rho}{ik} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

é a matriz de descontinuidade que conectar as regiões de potencial $V_2 = V_0$ e $V_3 = V_1 = 0$. É importante observar que para fazer $\mathbf{d}_{12} \rightarrow \mathbf{d}_{21}$, basta inverter as frações em todos os elementos da matriz. Isso será interessante para implementação do código da matriz de transferência.

De posse das matrizes de descontinuidade $\mathbf{d}_{12}$ e $\mathbf{d}_{21}$, necessitamos de uma matriz para transladar a função de onda de um ponto a outro. Um forma para descrever essa translação é incluir um fator de fase na matriz de descontinuidade. Esse processo de transladar o sistema de coordenadas é implementado por uma matriz de propagação $\mathbf{p}$, que será definida abaixo.

Para a matriz de propagação, é conveniente escrever a função de onda como um produto escalar vetorial, ou seja

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \psi(x) &= \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Agora, consideramos uma translação do sistema de coordenadas para a direita, a uma distância a (largura da barreira), ou seja, $x' = x - a$. É assumido que o ponto $x = a$ também esteja dentro da região de potencial constante. Podemos determinar a função de onda nesse novo sistema de coordenadas, que denotaremos como $\bar{\psi}(x')$, exigindo que a condição de continuidade $\bar{\psi}(x') = \psi(x)$ seja satisfeita, logo,

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x') &= \psi(x) = \psi(x' + a), \\ \bar{\psi}(x') &= Ae^{ikx'}e^{ika} + Be^{-ikx'}e^{-ika},\end{aligned}$$

onde usamos $x = x' + a$. Redefinindo os coeficientes, $A' \equiv Ae^{ika}$ e $B' \equiv Be^{-ika}$, teremos

$$\bar{\psi}(x') = A'e^{ikx'} + B'e^{-ikx'}.$$

Assim, o efeito provocado na função de onda devido à translação no sistema de coordenadas por uma distância a será equivalente a fazermos as seguintes modificações nos coeficientes: $A \rightarrow A'e^{-ika}$ e $B \rightarrow B'e^{ika}$ ou, em termos matriciais,

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Definimos então a matriz propagação $\mathbf{p}$ como sendo

$$\mathbf{p} \equiv \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

De posse das matrizes de descontinuidade $\mathbf{d}$ e de propagação $\mathbf{p}$, podemos construir finalmente a matriz de transferência para o caso de uma barreira simples. Para o potencial dado pela Fig. 2, teremos a relação que conecta a função de onda da região I com a função de onda na região III da seguinte forma: (i) aplicando uma descontinuidade de I-II ($\mathbf{d}_{12}$); (ii) uma propagação a uma distância a na região II ($\mathbf{p}_2$); (iii) finalmente, aplicando uma descontinuidade de II-III ($\mathbf{d}_{21}$). Assim, tomando a propagação da esquerda para a direita, teremos

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{d}_{12}] \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_T \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix},$$

onde $\mathcal{M}_T = [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{d}_{12}]$ é definida como a matriz de transferência que relaciona os coeficientes das funções de onda do lado esquerdo (entrada) com aqueles do lado direito (saída) da barreira de potencial. Identificando os elementos da matriz $\mathcal{M}_T$, teremos

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

onde fizemos $A_1 = 1$, $B_1 = r$, $A_3 = t$ e $B_3 = 0$, como definido antes. A Eq. (3.45) nos dá um sistema de duas equações, de onde podemos obter o coeficiente de transmissão, dado por

$$t = \frac{1}{m_{11}}. \quad (3.46)$$

Portanto, para o caso da barreira simples e energia $E < V_0$, é até relativamente fácil obter analiticamente os coeficientes m_{ij} da matriz $\mathcal{M}_T$, dados por

$$\begin{aligned} m_{11} &= e^{-2ika} \left[\cosh(2\rho a) + i \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh(2\rho a) \right], \\ m_{12} &= i \frac{k^2 + \rho^2}{2\rho k} \sinh(2\rho a), \\ m_{21} &= -i \frac{k^2 + \rho^2}{2\rho k} \sinh(2\rho a), \\ m_{22} &= e^{2ika} \left[\cosh(2\rho a) - i \frac{k^2 - \rho^2}{2\rho k} \sinh(2\rho a) \right]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

A partir desses coeficientes, podemos ver que $m_{22} = m_{11}^*$ e $m_{12} = m_{21}^*$, que é uma propriedade geral da MT. Uma outra propriedade interessante de $\mathcal{M}_T$ é que o seu determinante é unitário ($\det \mathcal{M}_T = 1$).

Dessa maneira, podemos obter a probabilidade de transmissão total T a partir da Eq. (3.46), dada por

$$T = |t|^2 = \frac{1}{|m_{11}|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 + \rho^2)^2}{4k^2\rho^2} \sinh^2(\rho a) \right]^{-1}, \quad (3.48)$$

que é idêntica à Eq. (3.29).

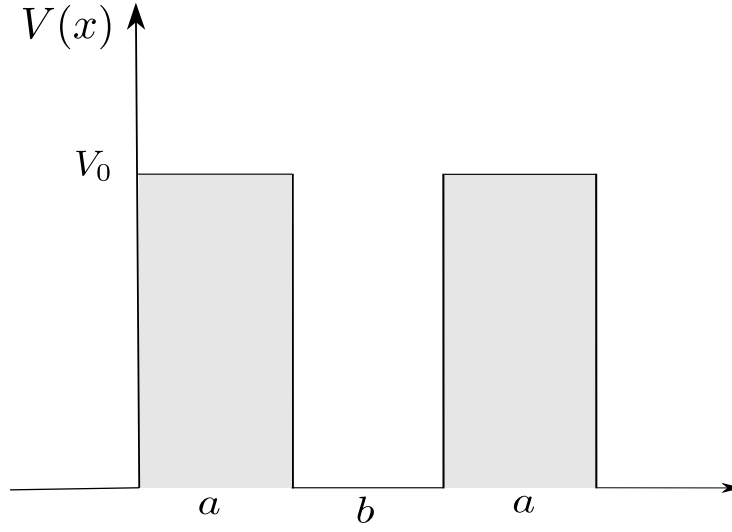
A respectiva matriz $\mathcal{M}_T$ apresenta determinadas propriedades que facilitam a análise dos fenômenos no sistema de barreira retangular. De posse dessa compreensão, vamos avançar para o caso de barreira dupla e verificar, a partir da periodicidade do sistema, uma relação geral para um conjunto de N barreiras idênticas. Por fim, analisaremos o limite da super-rede, ou seja, o caso em que $N \rightarrow \infty$.

3.2 BARREIRA DE POTENCIAL DUPLA

Vamos estender o formalismo da matriz de transferência para um sistema genérico de N barreiras. Inicialmente, partiremos do sistema de barreira dupla para entender melhor como essas matrizes são geradas e, em seguida, faremos a generalização.

Se duas barreiras são colocadas a uma distância razoavelmente pequena uma da outra (no mesmo cristal, talvez alguns nanômetros), o sistema é conhecido como barreira dupla (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018) e possui propriedades de transmissão bastante diferentes daquelas apresentadas para o caso de barreira única. Na literatura especializadas podemos encontrar um sistema de dupla barreira dispostas simetricamente e com certa assimetria (DATTA, 1989; FERRY; GOODNICK, 1997). Para efeito de simplicidade, tomaremos o primeiro caso, onde a altura das barreiras é constante, como está representado na Fig. 4.

Figura 4 – Dupla barreira de potencial.



Fonte: Elaborado pelo Autor

A região entre as duas barreiras de potencial, que podemos ver como um poço quântico, terá níveis de energia discretos devido ao confinamento quântico. Assim, quando a energia da onda incidente coincidir com uma destes estados de energia ressonantes do poço quântico, a transmissão através da dupla barreira será máxima ($T = 1$). Esse efeito é conhecido como tunelamento ressonante e pode ser útil como dispositivo de filtragem para certas energias (FERRY, 2020).

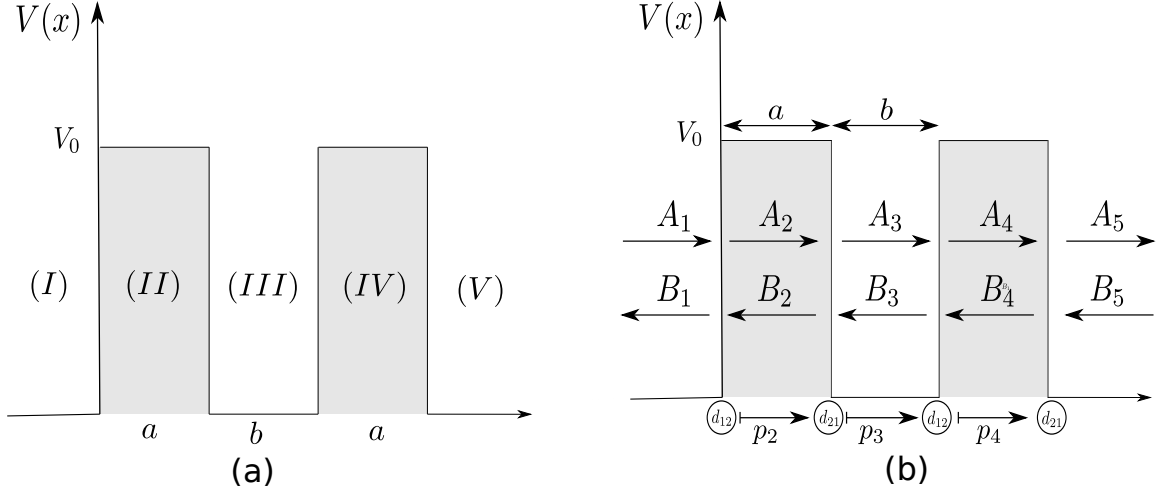
Existem duas abordagens para determinar o coeficiente de transmissão através das barreiras. A primeira é considerar as soluções da equação de Schrödinger (Eq. (3.10)) para cada região, casando tanto as funções de onda quanto as suas derivadas nas quatro diferentes interfaces (duas para cada uma das duas barreiras). A segunda abordagem, que é o principal propósito desse trabalho, é por meio da matriz de transferência, onde podemos aproveitar as matrizes definidas para a barreira simples e estender para o caso de duas barreiras idênticas. A Fig. 5 representa as regiões e o sentido de propagação da função de onda em cada uma delas.

A solução em cada região é conhecida, como foi discutido no caso da barreira simples, ou seja,

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & \text{região (I)} \\ A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x}, & \text{região (II)} \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & \text{região (III)} \\ A_4 e^{\rho x} + B_4 e^{-\rho x}, & \text{região (IV)} \\ A_5 e^{ikx} + B_5 e^{-ikx}, & \text{região (V)} \end{cases} \quad (3.49)$$

O tratamento de forma algébrica, como fizemos para o caso da barreira simples, se

Figura 5 – Barreira dupla de potencial, onde V_0 e a são a altura e largura da barreira, respectivamente, e b é a largura do poço entre as barreiras. Em (a) destacamos todas as regiões do sistema, enquanto em (b) mostramos os coeficientes e os sentidos de propagação das ondas para cada região.



Fonte: Elaborado pelo Autor

torna demasiadamente trabalhoso pelo número de equações e variáveis envolvidas quando aplicamos as condições de contorno entre as funções e suas derivadas em cada interface. No entanto, podemos expressar as Eqs. (3.49) em termos matriciais e determinar a relação que conecta os coeficientes da região V e da região I da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{d}_{12}] \cdot \mathbf{p}_3 \cdot [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_4 \cdot \mathbf{d}_{12}] \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_E \cdot M_W \cdot M_D \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

onde definimos as matrizes $M_E = [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{d}_{12}]$, que diz respeito à matriz de transferência da barreira à esquerda, e $M_D = [\mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{p}_4 \cdot \mathbf{d}_{12}]$ é a matriz da barreira à direita. Como estamos considerando barreiras simétricas, onde a e b são constantes, teremos $\mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_2$. $M_W = \mathbf{p}_3$ define a matriz de propagação na região do poço entre as barreiras.

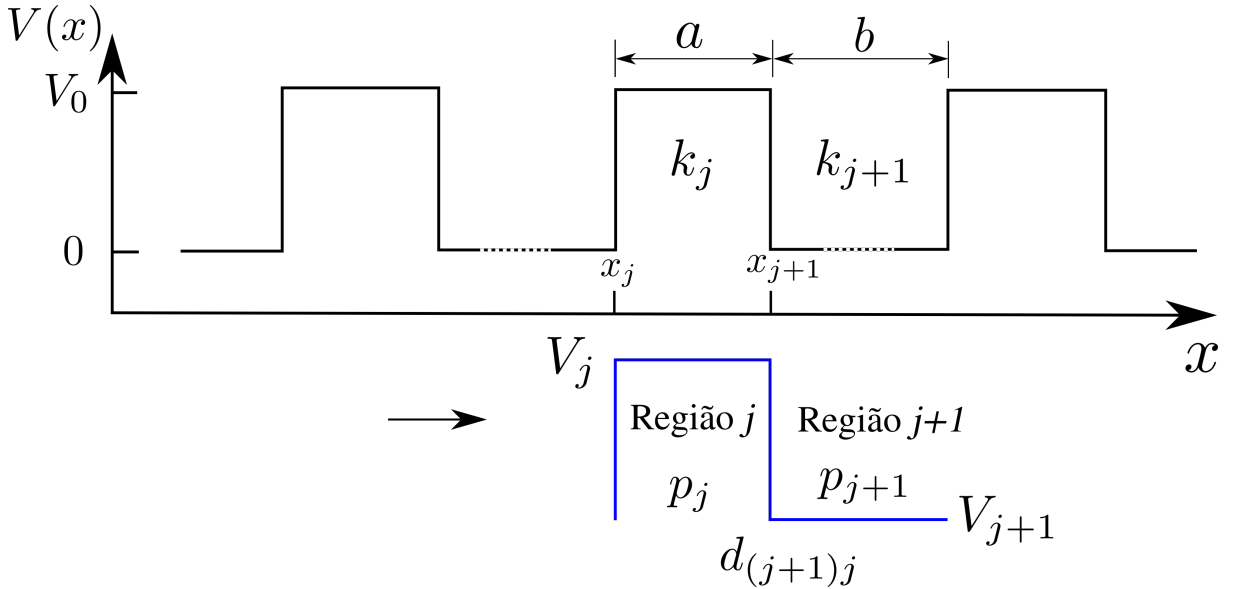
Portanto, fica claro que podemos agrupar as matrizes de transmissão previamente definidas de uma maneira adequada para obtermos a matriz de transferência em toda a estrutura. Como essas matrizes só dependem dos vetores de onda (k e ρ) e das larguras a e b , elas podem estar localizada em qualquer posição arbitrária ao longo do eixo x sem modificar as propriedades de transmissão.

Um ponto forte a ser considerado sobre o método da matriz de transferência é que ele simplifica o estudo de um conjunto de N barreiras finitas. Na próxima seção iremos calcular o coeficiente de transmissão para uma onda incidente, de energia E , em uma *array* de barreiras idênticas de altura V_0 .

3.3 N BARREIRAS DE POTENCIAL

A partir do formalismo da matriz de transferência, podemos generalizar o cálculo da transmissão para um número arbitrário N de barreiras. Este problema consiste essencialmente na definição das matrizes em cada uma das fronteiras e, como o sistema tratado aqui é periódico, basta definir uma matriz de célula unitária, para depois ser elevada a N barreiras que compõem o sistema. A fim de direcionar nosso problema para cálculos computacionais, vamos tratá-lo de forma discretizada e mais geral possível. A Fig. 6 representa um conjunto finito de N barreiras, onde destacamos em azul a célula unitária que gera esse conjunto. O potencial entre as interfaces x_j e x_{j+1} na região j é dada por V_j .

Figura 6 – Representação de um número finito N de barreiras de potencial retangular. Em azul, destacamos uma célula unitária que pode ser usada para gerar essa rede de barreiras.



Fonte: Elaborado pelo Autor

Considerando inicialmente apenas o degrau entre as regiões j e $j+1$, vamos calcular a matriz de propagação $\mathbf{p}_j$ para a propagação da na região j a uma distância $a_j = x_{j+1} - x_j$. Em seguida, determinaremos a matriz de descontinuidade $\mathbf{p}_{(j+1)j}$ na interface entre as regiões j e $j+1$. A matriz de propagação total será o produto dessas matrizes, como veremos a seguir.

A Fig. 6 mostra o detalhe de um degrau na posição $x = x_{j+1}$. Considerando um elétron, de energia E , viajando para a direita, o seu vetor de onda é dado por

$$k_j = \frac{[2m(E - V_j)]^{1/2}}{\hbar}, \quad (3.52)$$

na região j , e as funções de onda, que são soluções para a Eq. (3.10) nas regiões j e $j+1$, são respectivamente,

$$\psi_j = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x}, \quad (3.53)$$

$$\psi_{j+1} = A_{j+1}e^{ik_{j+1}x} + B_{j+1}e^{-ik_{j+1}x}. \quad (3.54)$$

Considerando a convenção que adotamos nas seções anteriores, A_j e A_{j+1} são coeficientes para a função de onda viajando da esquerda para a direita nas regiões j e $j+1$, respectivamente, e B_j e B_{j+1} são os correspondentes coeficientes de onda na direção contrária. Aplicando as condições de continuidade na interface $x = x_{j+1}$, usando as Eqs. (3.53) e (3.54), obtemos,

$$\psi_j|_{x=x_{j+1}} = \psi_{j+1}|_{x=x_{j+1}}, \quad (3.55)$$

e,

$$\left. \frac{d\psi_j}{dx} \right|_{x=x_{j+1}} = \left. \frac{d\psi_{j+1}}{dx} \right|_{x=x_{j+1}}. \quad (3.56)$$

Substituindo as Eqs. (3.53) e (3.54) nas Eqs. (3.55) e (3.56), obtemos duas equações,

$$A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} = A_{j+1} e^{ik_{j+1} x} + B_{j+1} e^{-ik_{j+1} x}, \quad (3.57)$$

$$A_j e^{ik_j x} - B_j e^{-ik_j x} = \frac{k_{j+1}}{k_j} A_{j+1} e^{ik_{j+1} x} - \frac{k_{j+1}}{k_j} B_{j+1} e^{-ik_{j+1} x}. \quad (3.58)$$

Vale ressaltar que, para heteroestruturas semicondutoras com diferentes massas efetivas de elétrons, a continuidade da corrente requer que todos os fatores $\left(\frac{k_{j+1}}{k_j}\right)$ na (3.58) sejam escritos na forma $\left(\frac{m_j k_{j+1}}{m_{j+1} k_j}\right)$, que não é o caso aqui estudado.

Reescrevendo as Eqs. (3.57) e (3.58) na forma matricial, temos,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_{j+1}}{k_j} & -\frac{k_{j+1}}{k_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

e isolando a matriz coluna $(A_j \ B_j)$ aplicando o produto da matriz inversa dos seus coeficientes (lado esquerdo), escrevemos,

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_{j+1}}{k_j} & -\frac{k_{j+1}}{k_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

ou seja,

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \mathbf{d}_{j(j+1)} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

em que

$$\mathbf{d}_{j(j+1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} \\ 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

é a matriz de descontinuidade na interface $x = x_{j+1}$. Para a interface $x = x_j$ teremos $\mathbf{d}_{(j+1)j}$, ou seja, tomando $j \leftrightarrow (j+1)$.

Observe que na Eq. (3.62) $d_{11} = d_{22}$ e $d_{21} = d_{12}$. Prosseguindo, precisamos calcular a matriz de propagação $\mathbf{p}_j$ para a propagação da função de onda na região j . Essa propagação desempenha o papel de transladar a função de onda entre as posições x_j e x_{j+1} , ou seja, a uma distância $a_j = x_{j+1} - x_j$. Como observado na Fig. 3.1, a propagação entre as interfaces do potencial, separadas pela distância a_j , carrega informações de fase apenas para que $A_j e^{ik_j a_j} = A_{j+1}$ e $B_j e^{ik_j a_j} = B_{j+1}$. Expressando isso na forma matricial,

$$\begin{pmatrix} e^{ik_j a_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j a_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.63)$$

ou,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{-ik_j a_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_j a_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} &= \mathbf{p}_j \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

em que

$$\mathbf{p}_j \equiv \begin{pmatrix} e^{-ik_j a_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_j a_j} \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

é a matriz de propagação na região j por uma distância a_j . Para a propagação na região do poço, teremos $\mathbf{p}_{j+1}$ com $k_j \rightarrow k_{j+1}$ e $a_j \rightarrow b_j$.

Poderemos agora obter a matriz de transferência $\mathbf{T}$ que descreve a propagação da partícula interagindo com a célula unitária destacada na Fig. 6. Combinando as matrizes definidas, teremos

$$\mathbf{T}_j = \mathbf{d}_{j(j+1)} \cdot \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{d}_{(j+1)j} \cdot \mathbf{p}_{j+1}, \quad (3.66)$$

que define a matriz da célula unitária destacada em azul na Fig. 6.

Para o caso geral de N barreiras de potencial, multiplicamos N vezes a matriz obtida na Eq. (3.66) para obter a matriz de propagação total,

$$\mathcal{M}_T = \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2 \cdots \mathbf{T}_j \cdots \mathbf{T}_N = \prod_{j=1}^{j=N} \mathbf{T}_j. \quad (3.67)$$

De forma geral, para N barreiras de potencias unidimensionais essencialmente arbitrários, temos que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \left(\prod_{j=1}^{j=N} \mathbf{T}_j \right) \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_T \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Neste caso, o elemento m_{11} de $\mathcal{M}_T$ nos dá a probabilidade de transmissão, ou seja,

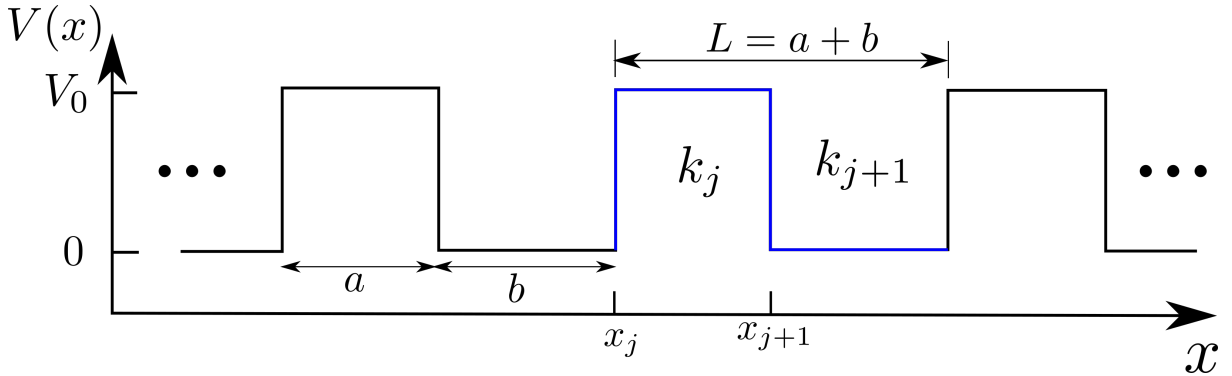
$$T = |t|^2 = \frac{1}{|m_{11}|^2}. \quad (3.69)$$

3.4 SUPER-REDES E O MODELO KRONIG-PENNEY PARA BARREIRAS DE POTENCIAL

Discutimos detalhadamente nos tópicos anteriores o processo de transmissão através de uma barreira simples, dupla e um caso geral quando tratamos um número arbitrário de N barreiras. Nessa seção, iremos usar o método da matriz de transferência para explorar o caso em que temos um número infinito de barreiras ($N \rightarrow \infty$), que é conhecido como uma super-rede. É interessante destacar que quando tomamos uma aproximação de barreiras muito estreitas ($a \rightarrow 0$) e de alturas relativamente grandes ($V_0 \rightarrow \infty$), temos potenciais do tipo δ que podem ser aproximados como potenciais de uma rede cristalina de átomos (LEVI, 2006).

A Fig. 7 apresenta um exemplo simples de uma estrutura periódica com alternância de barreiras e poços, formando uma supe-rede. Uma estrutura similar também é conhecida como modelo de Kronig-Penney (KP).

Figura 7 – Exemplo de super-rede como uma estrutura infinita de potenciais periódicos. Temos poços de largura b alternando com barreiras de espessura a e altura V_0 . A constante de rede (ou super-rede) é definida como $L = a + b$.



Fonte: Elaborado pelo Autor

O modelo KP é amplamente utilizado na física da matéria condensada para entender a propagação de elétrons em estruturas cristalinas e materiais com estruturas periódicas. Ele revela a existência de intervalos de energias permitidas para os elétrons, chamadas de bandas de energia, e intervalos de energias proibidas, conhecidas por *gap* de energia (ou *bandgap*). A largura das bandas e a profundidade dos poços são determinadas pelas propriedades da estrutura periódica e pelo potencial de barreira da estrutura. O modelo KP é um modelo simplificado que não leva em consideração muitos dos efeitos que ocorrem em sistemas reais, mas ainda assim é útil para entender os principais comportamentos dos elétrons em estruturas periódicas (KRONIG; PENNEY, 1931; KITTEL, 2006; ASHCROFT; MERMIN, 2022).

Como estamos lidando com um potencial periódico, definimos um período espacial $L = a + b$ de modo que $V(x) = V(x + nL)$, onde n é um número inteiro. Desse modo, é

razoável esperar que a probabilidade do elétron seja modulada espacialmente com a mesma periodicidade do potencial. Assim, devemos escolher uma função de onda do elétron que é determinada por uma função periódica $U_k(x)$ com um fator de fase e^{iKx} , ou seja,

$$\psi_k(x) = U_k(x)e^{iKx}, \quad (3.70)$$

onde $U_k(x + nL) = U_k$ tem a mesma periodicidade do potencial e o fator de fase e^{iKx} está relacionado a informação de fase entre duas células unitárias via vetor de onda de Bloch K . Por sua vez, a Eq. (3.70) é conhecida por função de Bloch (LEVI, 2006).

Se desejamos conhecer como o valor da função de onda do elétron muda a partir de uma posição x para $x + L$, basta encontrarmos

$$\begin{aligned} \psi_k(x + L) &= U_k(x + L)e^{iK(x+L)} \Rightarrow \psi_k(x + L) = U_k(x)e^{iKx}e^{iKL} \\ \psi_k(x + L) &= \psi_k(x)e^{iKL}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

A Eq. (3.71) é um exemplo do teorema de Bloch. Em outras palavras, o teorema de Bloch afirma que um potencial com período L possui funções de onda que podem ser separadas em uma parte com o mesmo período do potencial e um termo de fase de onda e^{iKL} .

Para construirmos a MT no sistema super-redes, utilizamos as matrizes advinda de cada célula unitária mostradas na seção anterior. Cada célula unitária é representada pela matriz $\mathbf{T}_j$, que combina o espalhamento dentro de cada célula com a mudança de fase de uma célula para a próxima. É importante distinguir entre o número de onda de Bloch (K), responsável por descrever a mudança de fase da função de onda de uma célula unitária para a próxima, e o número de onda (k_j), que descreve a função de onda do elétron em uma região específica de cada célula, estando relacionado com sua energia através da equação $E = \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m}$. É importante destacar que esses dois números de onda possuem papéis distintos no estudo das propriedades da super-rede, sendo K responsável por descrever a periodicidade da estrutura, enquanto k_j está relacionado diretamente com as energias possíveis do elétron.

Como foi feito antes, vamos representar os coeficientes das ondas para a direita e para a esquerda célula n como A_n e B_n , respectivamente. Utilizando o teorema de Bloch e a matriz $\mathbf{T}$, podemos relacionar os coeficientes como,

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = e^{(-iKL)} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}, \quad (3.72)$$

onde $\mathbf{T}$ é a matriz de transferência que relaciona as amplitudes dos coeficientes A e B na célula n com as amplitudes correspondentes na célula $n + 1$. O autovalor $e^{(iKL)}$ representa um resultado da matriz $\mathbf{T}$. É importante destacar que as matrizes- T não são Hermitianas, por isso, seus autovalores podem ser complexos.

A Eq. (3.72) pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} t_{11} - e^{-iKL} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} - e^{-iKL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0. \quad (3.73)$$

Sendo t_{ij} os elementos da matriz $\mathbf{T}$. Uma solução desse conjunto de equações lineares e homogêneas existe se o determinante da matriz 2×2 da Eq. (3.73) é zero, isto é,

$$\begin{aligned} (t_{11} - e^{-iKL})(t_{22} - e^{-iKL}) - t_{12}t_{21} &= 0 \\ t_{11}t_{22} + e^{-2iKL} - t_{22}e^{-iKL} - t_{11}e^{-iKL} - t_{12}t_{21} &= 0. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Como sabemos das propriedades da matriz $\mathbf{T}$ de que $t_{11} = t_{22}^*$ e $t_{12} = t_{21}^*$, podemos reescrever a equação acima como

$$e^{-2iKL} - 2t_{11}e^{-iKL} = -t_{11}t_{22} + t_{12}t_{21} = -|\mathbf{T}| \quad (3.75)$$

Outra propriedade importante da matriz $\mathbf{T}$ é que $|\mathbf{T}| = 1$ para K real. Tomando agora a parte real de ambos os lados da Eq. (3.75), teremos

$$e^{-2iKL} - 2\text{Re}(t_{11})e^{-iKL} = -1. \quad (3.76)$$

A partir da relação de Euler, $e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$, podemos escrever

$$[\cos(2KL) - i\sin(2KL)] - \text{Re}(t_{11})[\cos(KL) - i\sin(KL)] = -1. \quad (3.77)$$

Tomando a parte imaginária dessa expressão igual a zero,

$$\sin(2KL) - 2\text{Re}(t_{11})\sin(KL) = 0. \quad (3.78)$$

Usando a relação trigonométrica $2\sin(\theta)\cos(\theta) = \sin(2\theta)$, a Eq. (3.78) pode ser escrita como

$$2\sin(KL)[\cos(KL) - \text{Re}(t_{11})] = 0. \quad (3.79)$$

Portanto,

$$\cos(KL) = \text{Re}(t_{11}). \quad (3.80)$$

Como K só pode ser real, então temos a seguinte relação

$$|\text{Re}(t_{11})| \leq 1. \quad (3.81)$$

Essa relação gera as bandas permitidas para valores reais do número de onda de Bloch K .

Considerando a super-rede representada na Fig. 7 e o elemento t_{11} da matriz $\mathbf{T}_1$, dada a partir da Eq. (3.66), obtemos finalmente

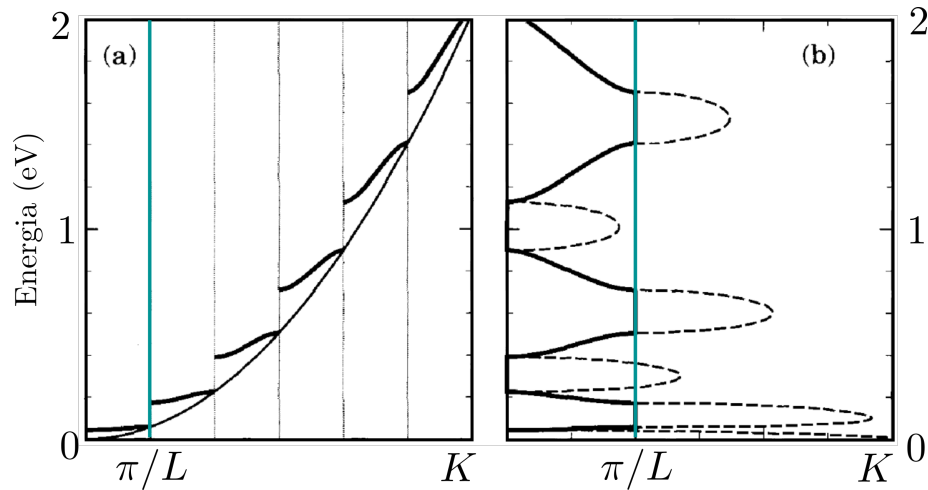
$$\cos[K(a+b)] = \cosh(\rho a) \cos(kb) - \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh(\rho a) \sin(kb). \quad (3.82)$$

Uma simplificação interessante é quando essa super-rede de barreiras retangulares se reduz ao caso particular de uma super-rede de potenciais do tipo δ . Como discutido antes, essa aproximação é feita quando a largura da barreira é tomada muito estreita ($a \rightarrow 0$) e sua altura muito grande ($V_0 \rightarrow \infty$) de tal modo que o termo $aV_0 \equiv S$ é mantido constante. Assim, a Eq. 3.82 se reduz a

$$\cos(KL) = \cos(\rho L) + \frac{k}{\rho} \sin(\rho L). \quad (3.83)$$

A Fig. 8(a) mostra a relação de dispersão $E(K)$, ou seja, a energia em termos do número de onda de Bloch. Como o potencial é periódico em L podemos representar $E(K)$ em uma zona reduzida limitada por $0 \leq K \leq \pi/L$, conhecida como zona de Brillouin, como mostrado na Fig. 8(b). As bandas de energia permitidas da Fig. 8 podem ser pensadas como surgindo de ressonâncias individuais de todos os poços de potencial (de largura L) que estão acopladas através de efeitos de tunelamento. Existem um grande número de tais ressonâncias que se sobrepõe em energia para formar uma banda de energia permitida de forma contínua. Por outro lado, regiões de energia proibida (*gaps*) são formados onde não existe ressonâncias. Na fronteira entre as energias permitidas e a região de *gap*, as funções de onda são ondas estacionárias e possuem simetria definida (LEVI, 2006).

Figura 8 – (a) Relação de dispersão $E(K)$ em uma representação de zona estendida. A zona delimitada por $0 \leq K \leq \pi/L$ é denominada zona de Brillouin. (b) Relação de dispersão $E(K)$ em uma representação de zona reduzida (dentro da zona de Brillouin). A curva parabólica contínua em (a) representa a relação de dispersão para elétrons livres. A curva tracejada em (b) mostra a parte imaginária do número de onda nas zonas proibidas (*gaps*).



Fonte: Adaptada de Davies (1998).

Existem outras formas de calcular a relação de dispersão eletrônica em potenciais periódicos. Uma dessas abordagens é a chamada aproximação de ligação forte (*tight-binding*). Essa aproximação é muito comum quando se tem um elétron se propagando em uma estrutura cristalina de um dado material. A estrutura eletrônica de uma rede periódica de átomos é então desenvolvido permitindo uma pequena sobreposição de funções

de onda eletrônica entre átomos adjacentes, o que é análogo ao que discutimos para a super-rede do tipo δ . Para maiores detalhes sobre essa abordagem, recomendamos a Ref. (LEVI, 2006).

4 METODOLOGIA

Na presente metodologia consta os processos sistemáticos necessários para a construção do algoritmo da Matriz de Transferência. Para tanto, a operação metodológica concentra-se resgatar a modelagem matemática seguida da respectiva implementação na linguagem *Python*.

4.1 PROGRAMANDO EM *PYTHON*

Antes de passarmos a explicar a implementação do algoritmo, devemos nos debruçar em alguns pontos importantes no uso da *Python* na computação científica. Primeiramente, destaca-se que ela é uma linguagem interpretada. O código *Python* com uma extensão `.py` não precisa ser compilado. Podemos passá-lo diretamente para o interpretador *Python* e gerar a saída. Apesar de ser uma linguagem interpretada, existe um processo de compilação transparente que transforma o código texto em *bytecode*, que, por sua vez, é interpretado por uma *virtual machine*. Esse processo de *cacher* automatizado a torna um pouco mais lenta se comparado a outras linguagens usadas para a computação científica, contudo torna o ato de programar mais fluido e propenso se pensado a partir de uma introdução a programação.

Ainda podemos destacar o PEP-8. Este é um guia de estilos de código *Python* que é amplamente empregado, nele existem diversas ferramentas para checá-lo automaticamente. Por outro lado, o *The Zen of Python* ¹ é um pequeno texto que fala muito sobre o estilo de programação em *Python*. A implementação padrão da linguagem *Python* é chamada de *CPython* e, apesar de existirem outras implementações da especificação, é nesta que vamos utilizar, pois é a que hoje implementa a versão 3.9, que será utilizada nessa pesquisa.

4.2 BARREIRA SIMPLES E DUPLA

Para este caso será necessário o uso dos módulos `numpy`, `matplotlib` e `scipy`. Na *Python* a importação pode ser feita de forma completa, onde podemos indicar um *apelido* para o respectivo pacote. Para `numpy` usamos o indicador `np`, `matplotlib` com o sub-pacotes `pyplot` usamos `plt`. No caso do `scipy`, importamos apenas os sub-pacotes para o tratamento dos números complexos associados ao tratamento matricial necessário. Os sub-pacotes `linalg` e `optimize` tratam do manejo adequando de operações vetoriais dentro do conjunto dos complexos e sobre a otimização de funções (maximização ou minimização) de operações lineares respectivamente. Também dentro do `numpy`, importamos o sub-pacote `scimath` para o tratamento adequado dos valores das raízes quadrada.

¹ Pode ser lido aqui: [Link](#)

```
import numpy as np
from numpy.lib.scimath import sqrt
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import linalg
from scipy import optimize
```

A construção da MT dependerá dos parâmetros Energia (E), Potencial (V), Potencial inicial (V_0) e a largura da barreira (L). Tomaremos a modelagem apresentada na seção 3.1. O termo `assert len(V) == len(L)` assegura que o tamanho de V seja o mesmo de L . Essa necessidade advém do *loop* que será adicionado adiante em termos de N , por isso mesmo motivo tomamos $N = \text{len}(L)$. Como condição prévia e posterior ao *loop*, nos certificamos que os termos do potencial fora da barreira, ou seja $V_0 = 0$, seja implementado no início e final do *loop* de interações. A interação com a primeira interface da barreira, descrita pela matriz (3.39) é escrita por `transfer`. O termo `k[-1]` é o último elemento na matriz `k`, sendo `sqrt(E - V0)`, ou seja, o valor k na região externa. As interações dentro da barreira seguem dadas pela matriz (3.44), escrita como `transl`. Nela aplicado um *loop* dentro da barreira em N para $V[n]$ e usando a (3.38) de $V[n]$ para $V[n + 1]$ podemos obter a MT desejada. Para a MT fazemos `transfer` recebendo primeiramente o produto escalar (`dot`) entre `transl` e `transfer` e, após, recebendo o produto escalar de `transfer` e `jump`. Finalizamos por fazer a função `transfer_matrix` nos retornar os valores de `transfer`.

```
def transfer_matrix(E, V, L, V0):
    assert len(V) == len(L)
    N = len(L)
    V = np.append(V, V0)
    k = sqrt(2*(E - V))*(1/hbar)

    transfer = 0.5 * np.array([[1.0 + k[-1] / k[0], 1 - k[-1] / k[0]],
                              [1 - k[-1] / k[0], 1 + k[-1] / k[0]]])

    for n in range(N):
        transl = np.array([[np.exp(1j * k[n] * L[n]), 0],
                          [0, np.exp(-1j * k[n] * L[n])]])
        jump = 0.5 * np.array([[1.0 + k[n] / k[n + 1], 1 - k[n] / k[n + 1]],
                              [1 - k[n] / k[n + 1], 1 + k[n] / k[n + 1]]])

        transfer = np.dot(transl, transfer)
        transfer = np.dot(jump, transfer)
```

```
return transfer
```

Os valores das energias (E) são tomados por um vetor linha escrito por uma função no numpy dado por `linspace`, que também representa o intervalo de E a ser usado. As etapas do potencial e dos passos dos potenciais escrevemos na forma de `array`. Atribuímos a T (transmissão) a forma matricial preenchida de zeros o que permite as operações com matrizes dentro da função `transfer_matrix`. Dessa maneira, construímos um *loop* para tomarmos como amostra sobre todos os valores de E , exceto no caso de $E = V$. Por fim, usando a propriedade (3.69), poderemos plotar a transmissão. Segue abaixo as implementação. Finaliza-se a rotina de programação por estabelecer o `plot` do gráfico do coeficiente de transmissão (T) em função da Energia (E).

```
E = np.linspace(1e-20, 50, 700)
V = np.array([10])
L = np.array([1])
V0 = 0
T = np.zeros(len(E))

for i in range(len(E)):
    M = transfer_matrix(E[i], V, L, V0)
    T[i] = abs(linalg.det(M) / M[0, 0]) ** 2
```

4.3 N BARREIRAS

Nessa parte, necessitaremos apenas de dois módulos, `numpy`, para o trato de operações matriciais, e `matplotlib.pyplot` para o desenho dos gráficos desejados.

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
```

O algoritmo implementado a seguir, dependerá dos dados expostos nas seção 3.2. Procuramos implementar para o cálculo da probabilidade de transmissão para uma partícula de massa m incidente da esquerda para a direita em um perfil de potencial unidimensional $V(x)$. Primeiramente, definimos os parâmetros principais: o número de barreiras (`nbarreiras`), a largura da barreira (`bx`), a largura do poço (`wx`) e o valor do potencial barreira (`V0`). O primeiro *loop*, dado pelo índice j , fazemos a discretização dos elementos de potencial (V) e de passo de potencial (`dL`), escritos ambos na forma matricial completa por zeros dentro da biblioteca `numpy`. O respectivo *loop* tomará o elemento N escrito para o dobro do número de barreiras, pois o *loop* interpretará os passos

descrito na seção 3.2. Dessa forma teremos para o elemento j os valores de $dL[j] = wx$ e $V[j] = 0$ e para $j+1$, $dL[j+1] = bx$ e $V[j+1] = v0$. Nos certificamos que ao final do *loop*, para N implemente $dL[N] = wx$ e $V[N] = 0$.

```
nbarreiras =
bx =
wx =
v0 =
N = (2*nbarreiras)
dL = np.zeros([N+1,1])
V = np.zeros([N+1,1])

for j in range(0,(2*nbarreiras),2):
    dL[j] = wx
    V[j] = 0
    dL[j+1] = bx
    V[j+1] = v0

dL[N] = wx
V[N] = 0
```

Damos prosseguimento por definirmos os valores de constantes úteis, como a raiz quadrada de menos um (*eye*), a constante de de Planck reduzida (*hbar*), a carga do elétron (*echarge*) e a massa da partícula (*m*). Também definimos valores para a energia mínima (*Emin*) e máxima (*Emax*), a quantidade de pontos para a suavização da curva, o diferencial de energia (*dE*) necessário a discretização dos elementos do espaço. Por fim, definimos a massa pelo produto da massa do elétron e sua massa efetiva, bem como a carga elementar.

```
Emin=np.pi*1e-5
Emax=30
npontos= 1500
dE=Emax/npontos
hbar=1.05457159e-34
eye=complex(0.,1.)
m0=9.109382e-31
meff= 1.0
m=meff*m0
echarge = 1.6021764e-19
```

Os elementos de *E* devem ser escritos na forma matricial, tendo em vista que tomaremos produtos matriciais para a obtenção de *MT*. Dessa maneira, não somente os elementos de *E* tomarão forma matricial, como também os elementos das matrizes de passo

k , da matriz de propagação p e o termo Trans (coeficiente de transmissão).

```
E = np.ones([npontos,1])
k = np.ones([N+1,1], dtype = "complex_")
p = np.complex64([[0.,0.],[0.,0.]])
Trans= np.zeros([npontos,1])
```

Para energia de partícula fixa $E(j)$, calculamos o número de onda $k(i)$ para cada posição no potencial $V(i)$. O número de onda, que pode ser calculado usando a (3.52), terá natureza complexa. Em seguida, criamos e multiplicamos por cada matriz de propagação, p , para cada incremento na propagação x para obter a matriz de propagação total, $bigP$. Podemos então calcular o coeficiente de transmissão, Trans, para o valor atual da energia da partícula, $E(j)$. Para isso usaremos a propriedade da (MT) para obtermos a probabilidade de transmissão.

```
for j in tqdm(range(1,npontos+1)):
    E[j-1] = dE*j+Emin
    bigP = np.identity(2)

    for i in range(0,N+1):
        k[i] = np.sqrt(complex(2*echarge*m*((E[j-1]-V[i]))))/ hbar

    for n in range(0,N):
        p[0][0] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[0][1] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[1][0] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        p[1][1] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        bigP = np.matmul(bigP, p)

    Trans[j-1] = (abs(1/bigP[0][0]))**2
```

4.3.1 Efeitos em super-redes

Nesse caso, usaremos os resultado da seção 3.4. O vetor `vetorK` é uma lista que armazena os valores do vetor quântico para cada barreira. A variável j é usada para percorrer a lista `vetorK`. A expressão `vetorK[j-1]`, portanto, representa o elemento do vetor `vetorK` na posição $j-1$.

A expressão que é atribuída a `vetorK[j-1]` é uma operação matemática que envolve os elementos da matriz `bigP`. A matriz `bigP` é uma matriz 2×2 que armazena os valores das funções de onda após atravessarem uma barreira. O elemento `bigP[0][0]`

é o elemento da primeira linha e primeira coluna da matriz `bigP`, enquanto o elemento `bigP[1][1]` é o elemento da segunda linha e segunda coluna da matriz `bigP`.

A função `np.real` é utilizada para extrair o valor real do número complexo que é armazenado em `bigP[0][0]` e `bigP[1][1]`. Esses valores reais são somados e divididos por 2 para se obter o valor $0.5 * (\text{np.real}(\text{bigP}[0][0]) + \text{np.real}(\text{bigP}[1][1]))$, armazenado no vetor `vetorK`, que é uma lista de valores de k para cada nível de energia permitido. Esses valores são obtidos a partir da aplicação da função `arccos` do pacote `numpy`, que retorna o arco cosseno de um número complexo. O resultado é multiplicado por $\frac{1}{\pi}$ para obter uma escala de valores de k compatível com as unidades utilizadas no problema.

A operação $0.5 * (\text{np.real}(\text{bigP}[0][0]) + \text{np.real}(\text{bigP}[1][1]))$ retorna a soma dos elementos da diagonal principal da matriz `bigP`. Esses elementos são os coeficientes de reflexão e transmissão para o elétron incidente no poço quântico, e a soma desses valores é igual a 1, pois a energia total do elétron é conservada. Portanto, aplicando o arco cosseno nessa soma, obtemos um valor de k que corresponde ao máximo da probabilidade de transmissão do elétron pelo poço quântico.

Esse valor é armazenado no vetor `vetorK` para cada nível de energia considerado, e pode ser utilizado posteriormente para calcular a probabilidade de transmissão do elétron pelo poço quântico para cada nível de energia. Assim, teremos apenas uma particularidade se comparado a seção anterior.

```
for j in tqdm(range(1, npontos+1)):
    E[j-1] = dE*j+Emin
    bigP = np.identity(2)

    for i in range(0, N+1):
        k[i] = np.sqrt(complex(2*echarge*m*((E[j-1]-V[i])))) / hbar

    for n in range(0, N):
        p[0][0] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[0][1] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[1][0] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        p[1][1] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        bigP = np.matmul(bigP, p)

    vetorK[j-1] = (1/np.pi)*np.arccos(0.5*(np.real(bigP[0][0]) +
    ↪ np.real(bigP[1][1])))
```

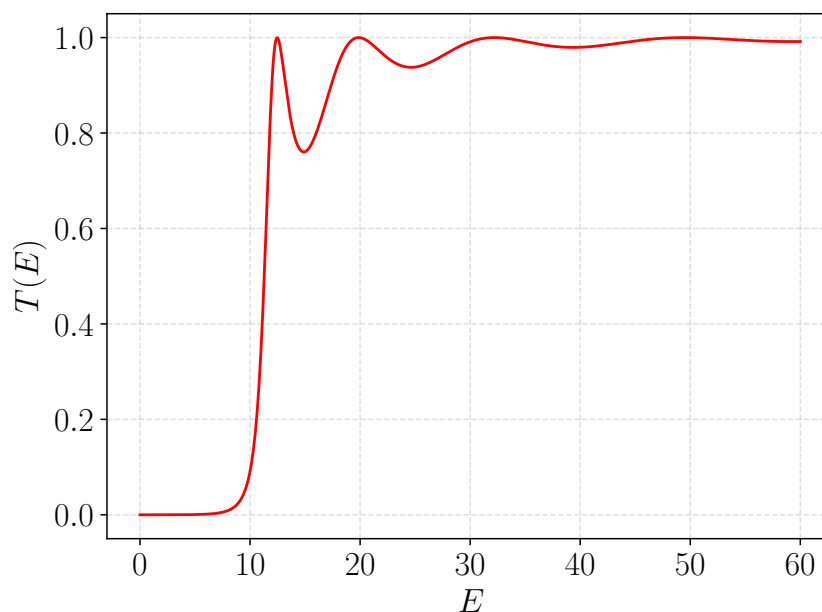
5 RESULTADOS

Inicialmente, usamos o código descrito na seção 4.2 para o caso de uma barreira apenas. Por sua simplicidade, podemos chegar a resultados mais limitados, contudo, ainda ricos em significado. Prosseguiremos em utilizar o *script* descrito na seção (4.3), que é uma abordagem mais geral e nos permitirá observar efeitos de tunelamento ressonante para N barreiras. Esse código também pode ser utilizado para simular modelos baseados em heteroestruturas semicondutoras, que é de extrema importância para entender as propriedades básicas de alguns dispositivos eletrônicos baseados nesses tipos de estruturas.

5.1 BARREIRA SIMPLES

Com base nos resultados da seção 3.1, podemos construir uma simulação da coleta de dados do coeficiente de transmissão com o *script* da 4.2. Para tanto, iremos considerar o caso particular da barreira simples tomando valores de energia abaixo e acima da altura da barreira V_0 . Consideramos $V_0 = 10$ eV e largura $a = 2$ nm. Esses valores são escolhidos de tal modo a estarem na ordem de grandeza daquelas normalmente usadas na literatura para heteroestruturas semicondutoras. Assim, o código desenvolvido (pode ser acessado na íntegra no Anexo A) calcula a transmissão para cada valor de energia e gera o gráfico mostrado na Fig. 9.

Figura 9 – Probabilidade de transmissão T versus energia E , em eV, para uma barreira de potencial retangular simples. Os parâmetros para a barreira são $V_0 = 10$ eV e $a = 2$ nm.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

Como prova de validação do código, obtemos o resultado esperado para o coeficiente de transmissão T de uma barreira simples, conforme mostrado nas Eqs. (3.31) e (3.32) tando para o intervalo de energia $E < V_0$, onde o elétron possui uma pequena chance de tunelar, como para energias $E > V_0$, onde são observados efeitos ressonantes em que temos $T(E) = 1$ para certos valores de energia.

É importante enfatizar que não estamos considerando aqui variação de massa efetiva que pode surgir quando temos, por exemplo, modelagem direcionadas para heteroestruturas reais como GaAs/AlAs/GaAs (PUJOL; CARLES; PÉREZ, 2014). Valores de massa efetiva para elétrons nessas estruturas podem atingir $0,067m_e$ para GaAs e de $0,1m_e$ para AlAs (onde m_e é a massa do elétron no vácuo), apenas para citar o efeito dessas estruturas e suas propriedades eletrônicas. No entanto, o presente código pode ser útil como exemplo simples para se trabalhar o fenômeno da transmissão em uma barreira de potencial retangular que normalmente é tratado de forma teórica em aulas de Introdução à Mecânica Quântica que, na maioria das vezes, a preocupação recai no desenvolvimento do cálculo, deixando de lado a discussão de alguns fenômenos físicos e aplicações que podem resultar desse sistema simplificado. Variando os parâmetros tais como altura e largura da barreira, podemos discutir muitos efeitos interessantes dentro do contexto da Mecânica Quântica. Nas próximas seções, iremos analisar alguns casos particulares do efeito de variação de V_0 e a em barreira simples e estender a discussão para um número arbitrário de barreiras até o caso limite das super-redes.

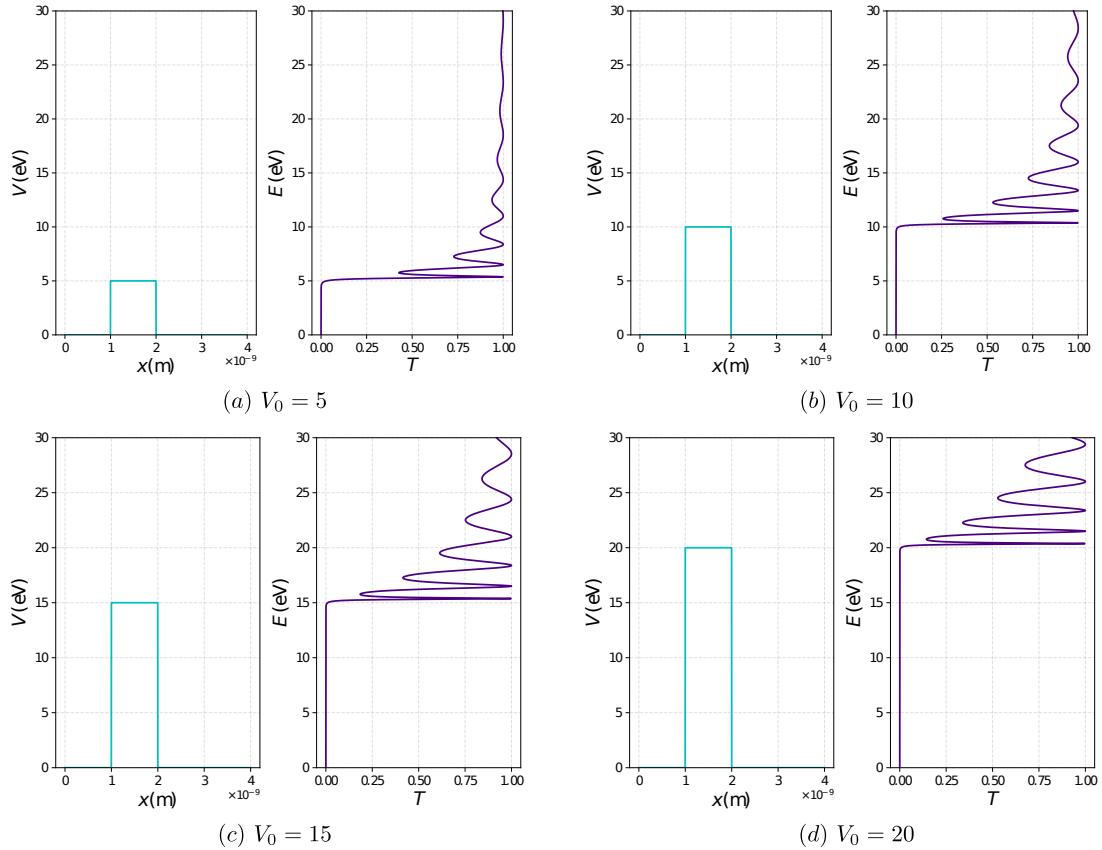
5.2 N BARREIRAS

Nessa seção, usaremos o *script* desenvolvido na seção 4.3 tanto para analisar melhor o caso da barreira simples e como para entender melhor algumas propriedades que surgem quando tomando um *array* de barreiras de potenciais. O código usado nessa seção se mostra mais geral e revela uma aplicação direta do método da matriz de transferência como um método útil para se obter resultados que, outrora, seria extremamente complicados de serem desenvolvidos analiticamente da forma usual em que se trabalha sistemas de barreira simples, como discutido antes. Para que o código possa ser usado dentro do contexto das heteroestruturas semicondutoras, inserimos a possibilidade de modificação da massa efetiva da partícula quando interage com determinado material. Além disso, o presente código computacional possibilita analisarmos como a variação de parâmetros, tais como altura e largura das barreiras e separação entre as mesmas (largura dos poços de potencial).

Inicialmente, analisamos os efeitos de V_0 e a em uma barreira simples. Para isso, mostramos na Fig. 10 os resultados para o caso em que mantemos a largura fixa $a = b = 1$ nm e variamos a altura da barreira em um intervalo de 5 a 20 eV. Com o intuito de visualizarmos melhor e localizar o valor da energia E em relação à altura da barreira, ou

seja, o efeito relativo entre $E - V_0$, dispomos lado a lado o perfil das barreiras de potencial $V(x)$ com seus respectivos resultados de transmissão $T(E)$ tanto para energias $E < V_0$ como para $E > V_0$. A escala de energia é a mesma nos respectivos pares de gráfico e está no eixo vertical.

Figura 10 – Probabilidade de energia E versus transmissão T para um elétron interagindo com uma barreira de potencial simples $N = 1$ com altura (a) $V_0 = 5$ eV, (b) $V_0 = 10$ eV, (c) $V_0 = 15$ eV e (d) $V_0 = 20$ eV. Em todos os casos, a largura da barreira é fixada em 1 nm.



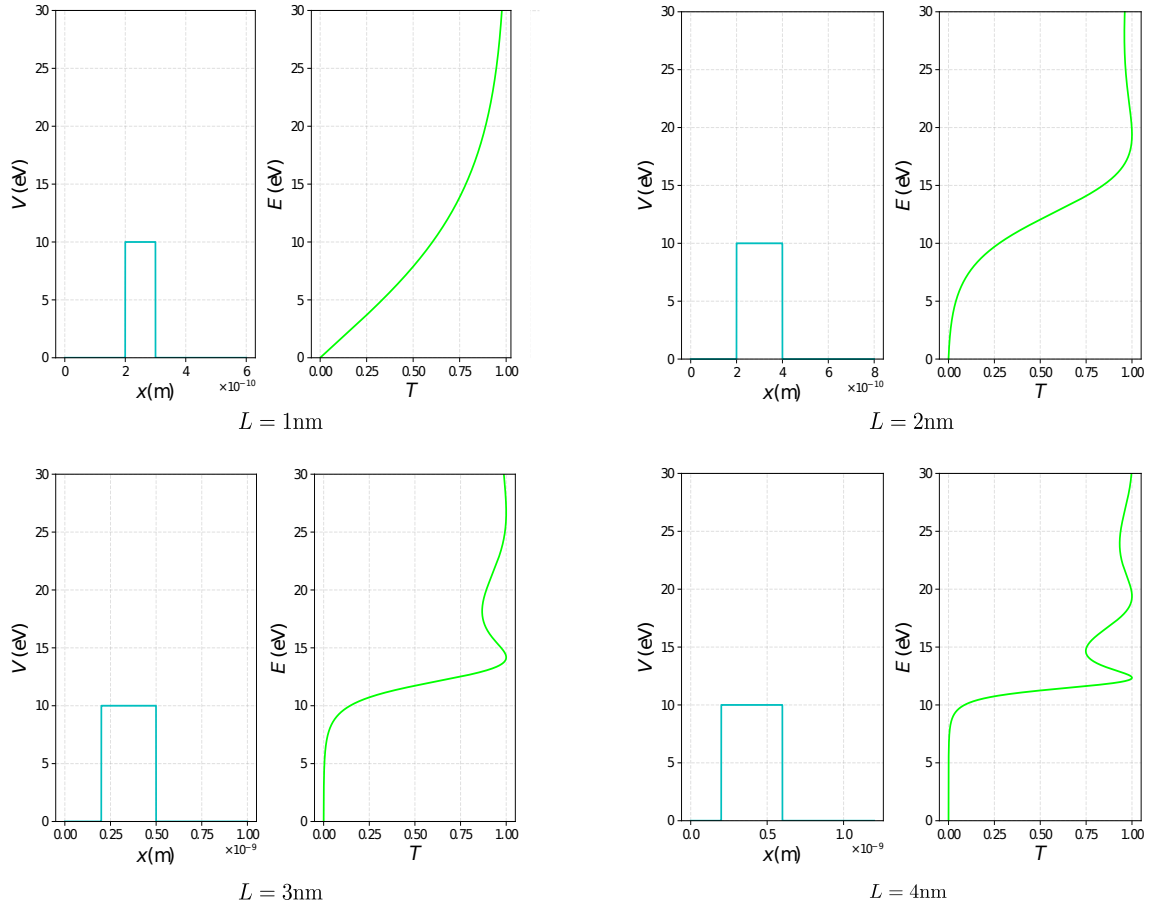
Fonte: Autoria própria.

Assim como observado Fig. 9, temos uma probabilidade de transmissão praticamente nula para valores de energia $E < V_0$ e uma pequena chance de tunelamento próximo a altura da barreira. Devido a grande escala de energia, esse efeito não é muito evidente nessa figura. Para valores de $E > V_0$, surgem os picos de transmissão ressonantes. Podemos ver que quando V_0 aumenta, o intervalo de energia onde a transmissão é praticamente nula também aumenta. Para $E > V_0$, temos valores de energia para o qual temos $T = 1$, ou seja, uma transmissão total que corresponde às funções de onda para o qual um número inteiro de $\lambda/2$ ajusta à largura da barreira. Esses pontos de transmissão máxima são conhecidos como picos de Ramsauer (WALKER; GATHRIGHT, 1992). O perfil desses picos não tem mudanças significativas, apenas uma translação para energias maiores com o aumento de V_0 .

Considerando ainda o caso particular da barreira simples, analisando o efeito da

variação na largura e mantendo a altura fixa nas propriedades de transmissão dos elétrons, mostramos os resultados na Fig. 11. Fixamos uma altura de barreira, $V_0 = 10$ eV, e largura variando entre 1 e 4 nanômetros. Como podemos ver, a largura a tem um efeito significativo sobre a transmissão de elétrons através da estrutura.

Figura 11 – O gráfico mostra o coeficiente de transmissão através de uma barreira retangular de largura variando de 1 a 4 nanômetros para uma altura de barreira fixa $V_0 = 10$ eV.



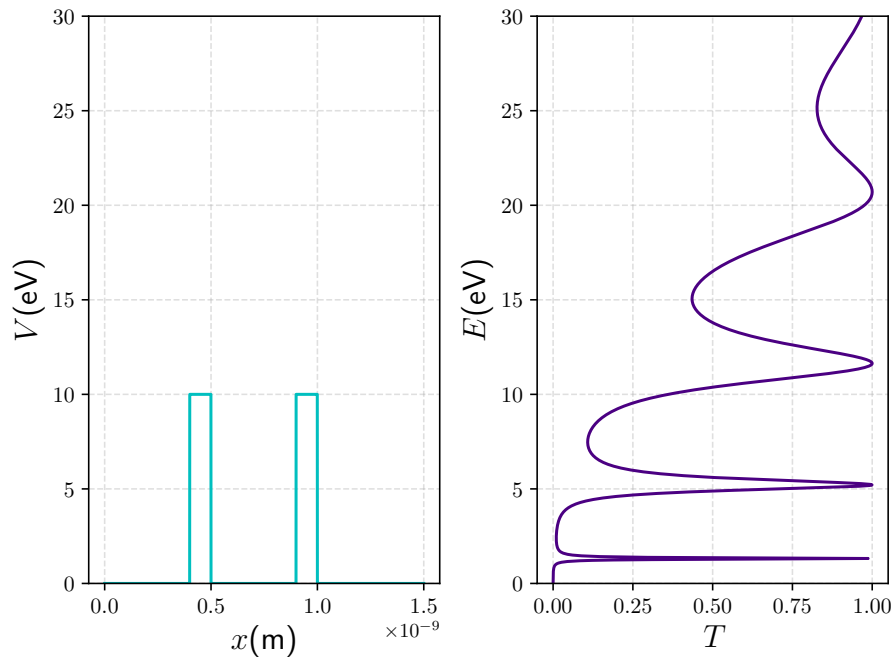
Fonte: Autoria própria.

Quando a largura da barreira é $L = 1$ nm, observamos um alto valor de coeficiente de transmissão para energias $E < V_0$, indicando que a maioria dos elétrons consegue atravessar essa barreira com facilidade. Isso pode ser explicado pelo efeito de tunelamento, no qual os elétrons podem passar através da barreira mesmo quando a sua energia é menor que a energia da barreira, uma característica puramente quântica que é proibida no contexto da Mecânica Clássica. À medida que a largura da barreira aumenta nos quadros subsequentes da Fig. 11 ($L = 2$, $L = 3$ e $L = 4$ nm, respectivamente), é observado uma diminuição progressiva no valor de coeficiente de transmissão para regiões $E < V_0$, ou seja, temos um aumento da probabilidade de reflexão dos elétrons na barreira, devido ao aumento da largura da barreira. Para valores $E > V_0$, temos o surgimento dos picos ressonantes com $T = 1$ devido aos efeitos de interferência da natureza ondulatória do elétrons.

Dessa maneira, observamos que a largura da barreira tem um efeito significativo sobre a transmissão de elétrons através da estrutura, ou seja, uma redução na largura da barreira implica um aumento a probabilidade de transmissão para o mesmo valor de energia devido ao maior efeito de tunelamento. Esse comportamento está em acordo com o que foi discutido na Eq. 3.33 para o decaimento da probabilidade de transmissão com o aumento da largura da barreira para valores fixos de E e V_0 .

Partindo para o caso particular da barreira dupla $N = 2$, a Fig. 12 mostra a probabilidade de transmissão de um elétron de massa m_0 incidente da esquerda para a direita do potencial dado. Observa-se assim que com o aumento da energia do elétron, há uma suavização na transmissão de fundo porque a barreira de potencial efetiva vista pelo elétron diminui. Em uma energia incidente $E = E_0 \approx 1,32 \text{ eV}$, há um pico unitário na probabilidade de transmissão que se destaca acima do fundo de transmissão eletrônica de variação suave.

Figura 12 – Barreira de potencial retangular dupla simétrica com largura de barreira de $0,1 \text{ nm}$, largura de poço de $0,4 \text{ nm}$ e energia de barreira de 10 eV . Há uma ressonância na energia E_0 para um elétron de massa m_0 em tal potencial. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da energia, e uma ressonância de transmissão unitária ocorre na energia $E = E_0 = 132 \text{ meV}$.

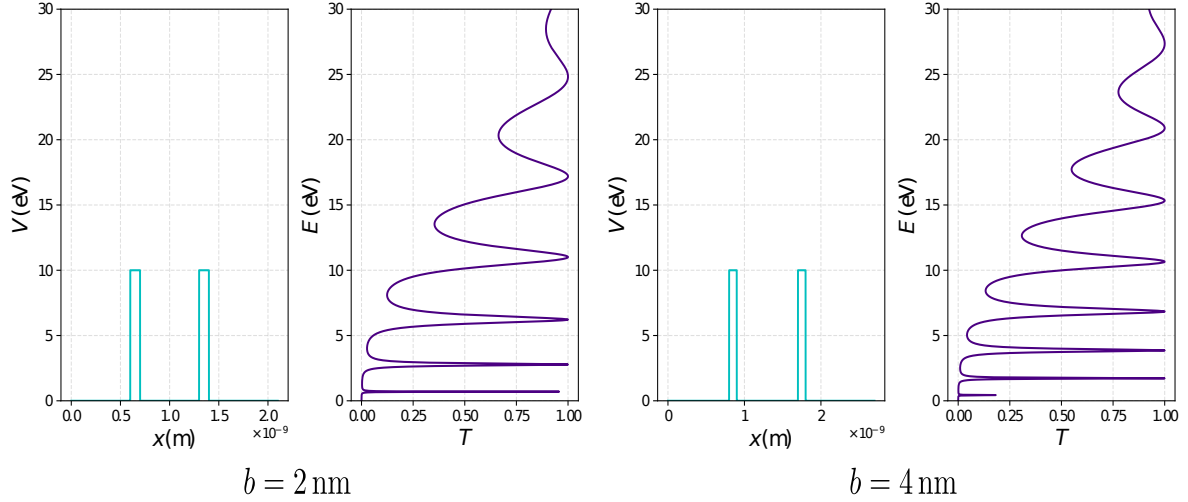


Fonte: Autoria própria.

Este pico existe porque um elétron incidente dos túneis esquerdos via ressonância no poço de potencial na energia E_0 . No pico de ressonância, uma superposição coerente de ondas de partículas retro-espalhadas de mudanças degrau no potencial se cancelam exatamente para dar reflexão zero e transmissão unitária.

Variando a largura dos poço formado pelas duas barreiras (Fig. 13), notamos uma

Figura 13 – Barreira de potencial retangular dupla simétrica com largura de barreira de 0,1 nm, largura de poço respectivamente de 2 e 4 nm e energia de barreira de 10 eV. Há uma ressonância na energia E_0 para um elétron de massa m_0 em tal potencial. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da largura do poço entre as barreiras.



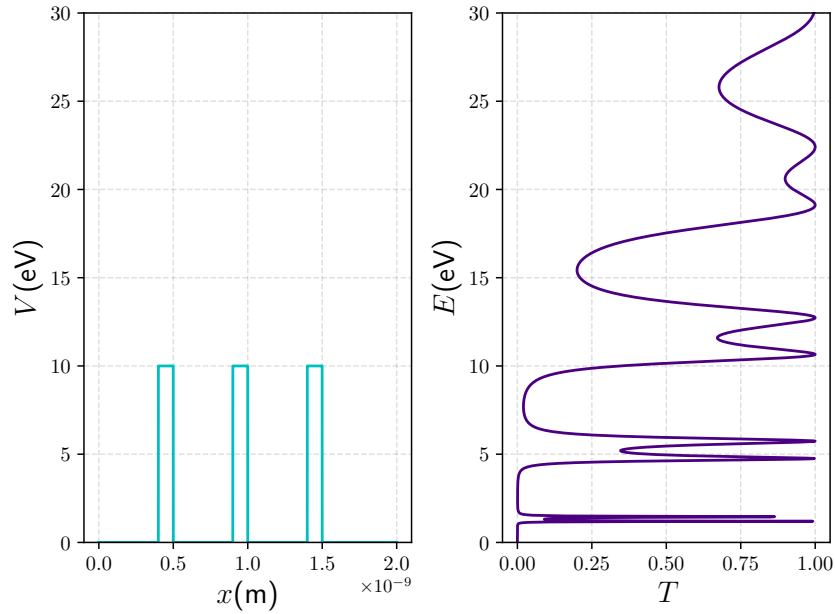
Fonte: Elaborado pelo Autor

modificação na localização e quantidade de picos ressonantes. Aumentando a largura do poço, o perfil da transmissão é alterado de modo que temos o reposicionamento dos picos ressonantes em diferentes energias, além da formação de novos picos para $E < V_0$. Essa modulação nos picos ressonantes é de grande importância em dispositivos eletrônicos que são baseados nesse tipo de estrutura ressonante. Uma das funções desses dispositivos é atuar como filtragem de partículas com energias específicas para diversas aplicações.

Em seguida, consideramos as três barreiras e os dois poços de potencial esboçados na Fig. 14. Conforme mostrado, existem duas ressonâncias separadas em energia por E , uma associada a uma função de onda assimétrica e outra a uma função de onda simétrica. Cada função de onda pode ser vista como formada a partir de uma combinação linear de duas contribuições de funções de onda simétricas de energia mais baixa para um único poço de potencial, uma do poço de potencial esquerdo e outra do poço de potencial direito. Essas contribuições individuais são inicialmente consideradas como estados ligados degenerados, posteriormente acoplados via tunelamento através da barreira de potencial central. A separação em energia entre as duas ressonâncias depende da força de acoplamento através da barreira de potencial central. Novamente, a ressonância de energia mais baixa neste poço de potencial duplo (formado entre a configuração das três barreiras de potencial) está associada a uma função de onda simétrica, e a ressonância de energia superior está associada a uma função de onda anti-simétrica. Ainda na Fig. 14, o pico de ressonância de energia mais baixa está em 1,2 eV, e a ressonância de energia superior está aproximadamente em 1,46 eV.

Quando o número do período aumenta para $N = 5$ (Fig. 15), aparecem alguns

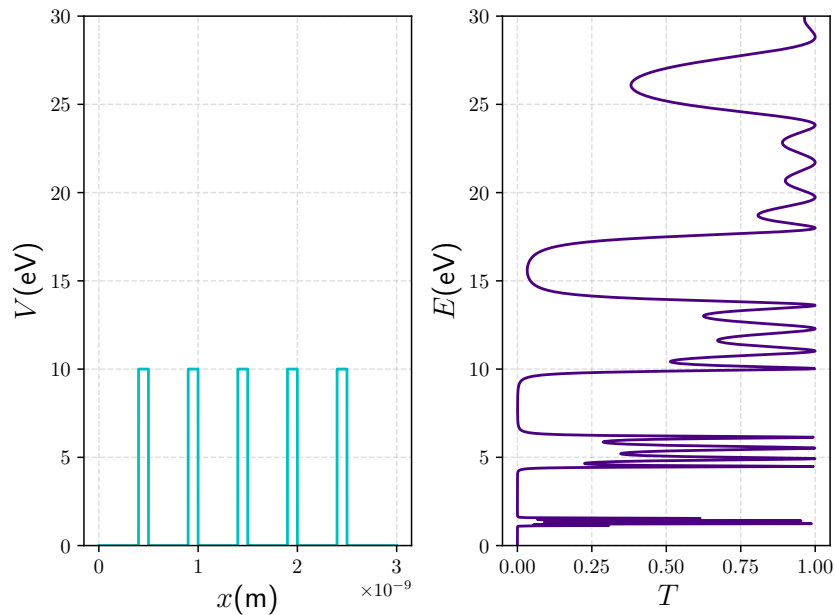
Figura 14 – Barreira de potencial retangular tripla e simétrica com largura de barreira de 0,1 nm, largura de poço de 0,4 nm e energia de barreira de 10 eV. Há um aumento geral na transmissão de fundo com o aumento da energia, e uma ressonância de transmissão unitária ocorre nos primeiros picos, nas respectivas energia $E_1 = 1,2$ eV e $E_2 = 1,46$ eV.



Fonte: Elaborado pelo Autor

“intervalos” de transmissão. As aspas são usadas para enfatizar que este não é um *gap* de transmissão verdadeiro, onde os elétrons ainda têm uma probabilidade de transmissão considerável para serem transportados através da estrutura.

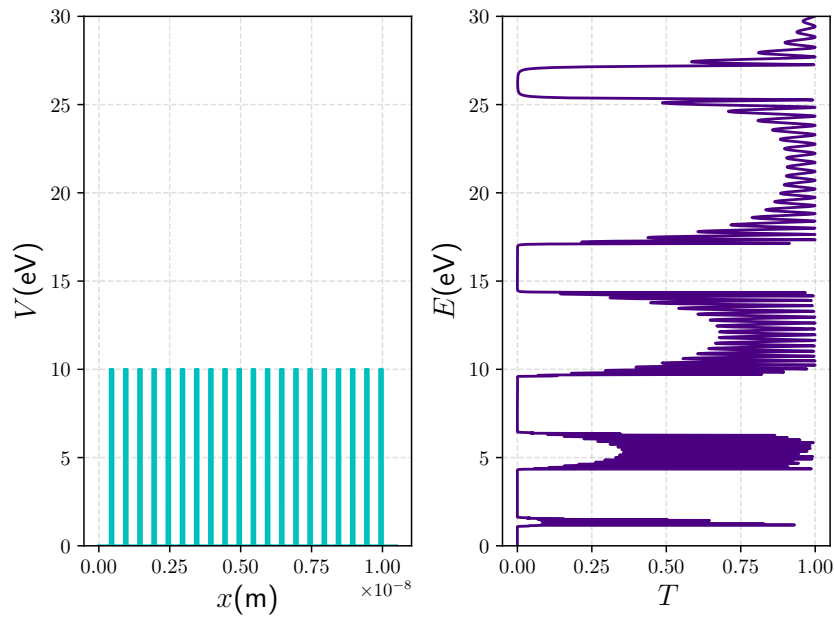
Figura 15 – Plot do da energia E em função do coeficiente de transmissão T para uma rede composta por 5 barreiras simétricas de potencial de 10 eV.



Fonte: Elaborado pelo Autor

Tomando o número de barreiras para 20, na Fig. 16, vemos que o número de oscilação da probabilidade de transmissão em ambos os lados dos *gaps* de transmissão aumenta com o número do período. Os resultados mostrados são uma extensão adicional do comportamento exibido pelos casos anteriores, mostrando regiões de picos atingindo a transmissão unitária separadas por regiões de transmissão próxima de zero. Os picos que tangenciam a linha $T = 1$ mostram as energias permitidas correspondentes às seis primeiras bandas de energia de um cristal, por exemplo.

Figura 16 – Plot da energia E em função do coeficiente de transmissão T para uma rede composta por 20 barreiras simétricas de potencial de 10 eV. Nesse tipo de configuração pode-se observar o efeito de tunelamento ressonante presente em sólidos cristalinos.



Fonte: Elaborado pelo Autor

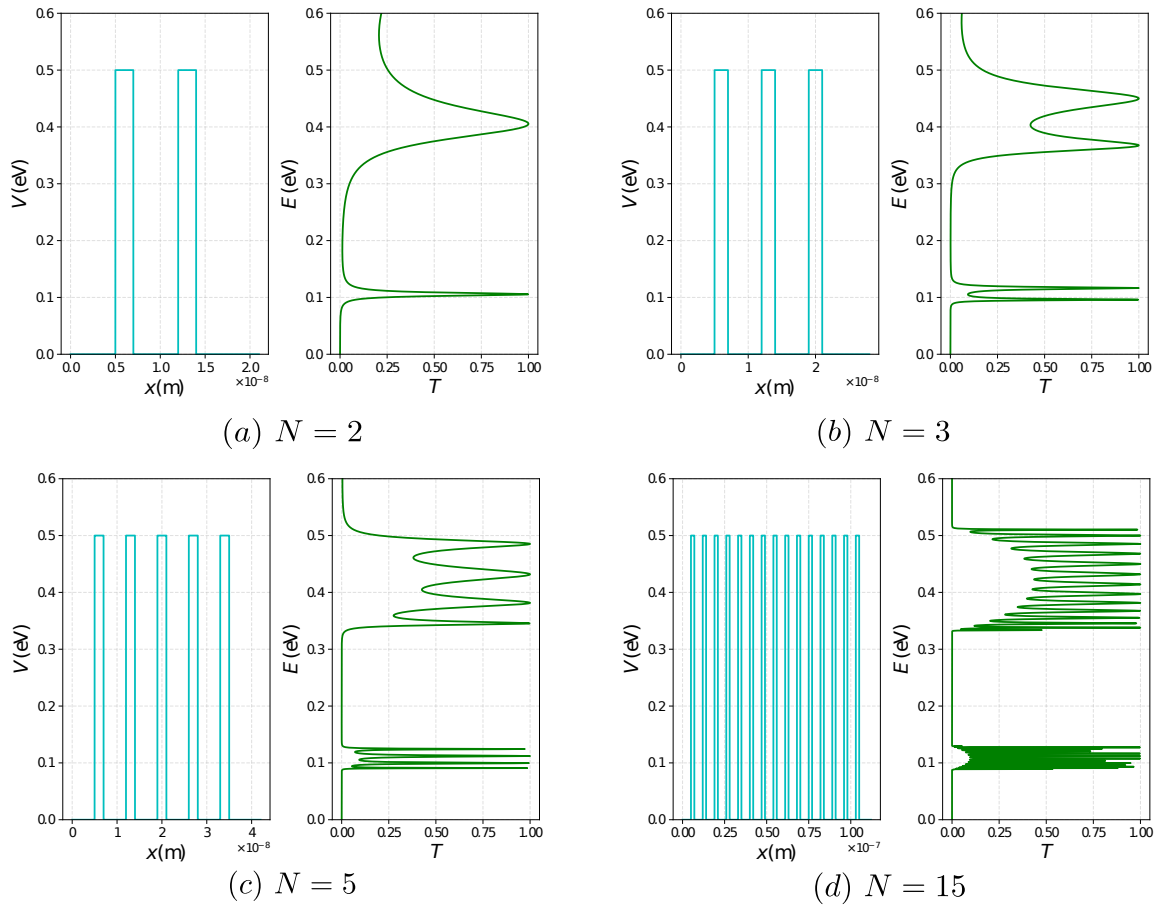
Observe que os picos estão preenchendo toda a extensão de cada banda, mostrando bem a aproximação de um sistema com muitas barreiras ao comportamento de um cristal unidimensional infinito. Quando o número do período aumenta para um número crítico ($N = 20$ na Fig. 16), a variação do número do período não tem efeito nos *gaps* de transmissão, mas tem efeito nos “*gaps*” de transmissão.

Até aqui discutimos muito sobre transmissão e tunelamento ressonante de partículas em várias barreiras de potencial. É natural se questionar se tais estruturas podem ser usadas para uso prático. Na verdade, é relativamente direto formar perfis de potencial similar a estes em estruturas semicondutoras. Tsu e Esaki (1973) estudaram tunelamento ressonante através de múltiplas barreiras em uma heteroestrutura GaAs/Ga_{0.5}Al_{0.5}As, onde um elétron de massa efetiva $0,067m_e$ tem uma energia potencial que é modelada por N barreiras idênticas de potencial $V_0 = 0,5$ eV e largura de $L = 2$ nm, separadas umas das outras por 5 nm. Repetindo este processo para $N = 3$, $N = 5$ e $N = 15$, obtêm-se

os correspondentes diagramas energéticos (T, E) (Fig. 17). A nitidez da ressonância (ou seja, fator de qualidade inversa) é afetada pelo tunelamento através das barreiras e, em particular, pelo acoplamento entre eventuais poços adjacentes. Este acoplamento induz a formação de minibandas de estados quasi-ligados, cujo número é igual ao dos poços acoplados. A posição de energia e largura de cada mini-banda são determinadas pela posição inicial e largura da ressonância através de um único poço quântico. Na Fig. 17, o primeiro pico de ressonância ($T \approx 1$) é para $E \approx 0,11$ eV e difere de 0 se $0,07 \leq E \leq 0,15$.

Observamos o aparecimento progressivo de uma estrutura de bandas: duas bandas permitidas ($T \approx 1$) separadas por uma banda proibida ($T = 0$) em que a propagação é impossível (espelho de Bragg). A lacuna vem do acoplamento entre as duas cavidades iniciais: os dois níveis E_1 e E_2 mantêm quase a mesma posição, mas são subdivididos em um número de estados quase ligados igual ao número de cavidades acopladas.

Figura 17 – Probabilidade de transmissão T versus energia E para um elétron de energia potencial modelado por N barreiras idênticas ($V_0 = 0,5$ eV, $L = 2$ nm) separadas umas das outras por 4 nm.



Fonte: Autoria própria.

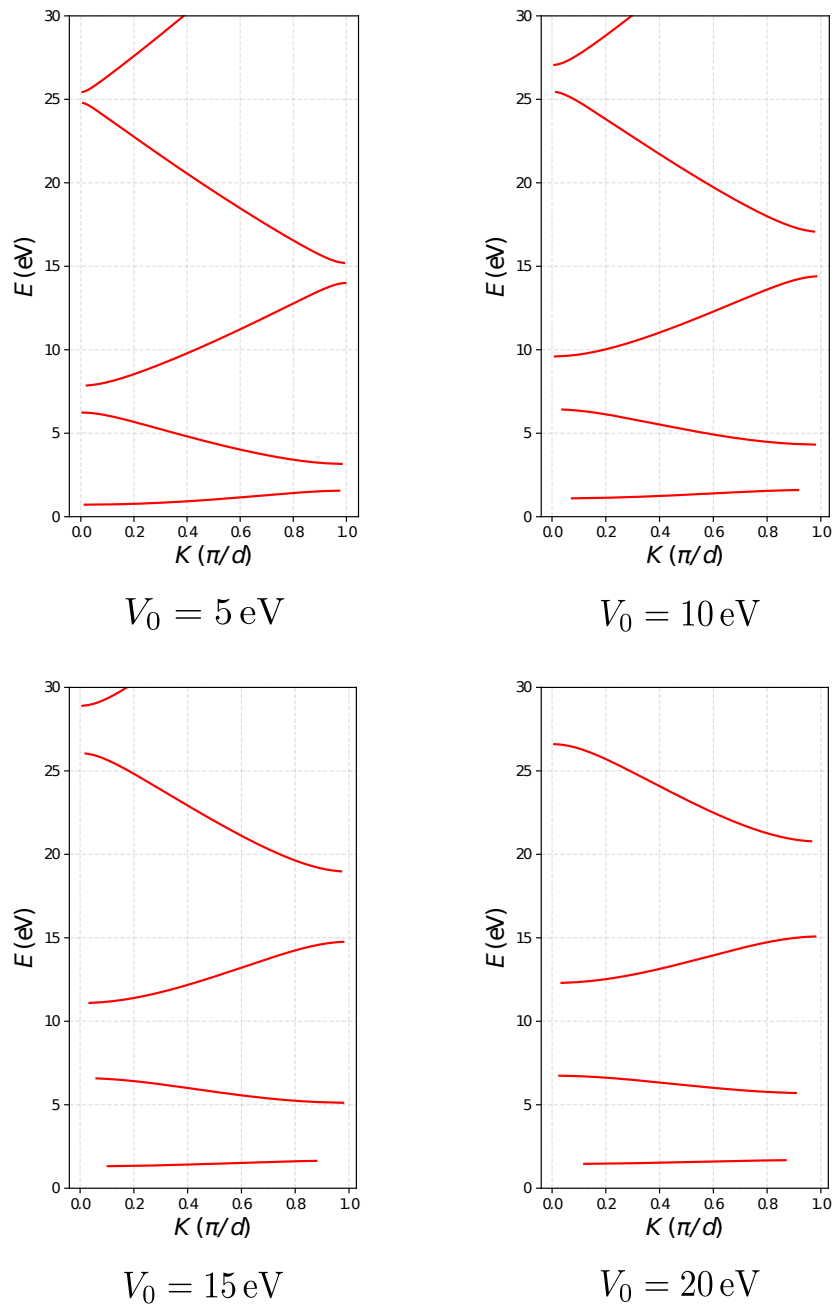
5.3 SUPER-REDES

Finalmente, iremos simular um sistema unidimensional de barreiras quando temos o caso particular $N \rightarrow \infty$, o que é conhecido como super-redes. Esse sistema tem atraído grande interesse nas últimas décadas dentro da área de dispositivos eletrônicos desde os trabalhos pioneiros de Esaki e Tsu (ESAKI; TSU, 1970; TSU; ESAKI, 1973). Isso se deve ao desenvolvimento de nanofabricação em Ciências dos Materiais e crescimento de super-redes semicondutoras (GRAHN, 1995). Uma estrutura de super-rede contém uma sequência periódica ou aperiódica de poços e barreiras quânticas que afetam as condições de transmissão de portadores de carga através das mesmas. As super-redes semicondutoras e heteroestruturas são de interesse não apenas por suas aplicações tecnológicas, mas também como fenômenos fundamentais de física devido às propriedades dos materiais e baixa dimensionalidade (SHOKRI, 2014). Dessa forma, simulamos uma super-rede composta por uma estrutura periódica de 1 nm (largura da barreira) e 4 nm (largura do poço). Usando a configuração da subseção (4.3.1) encontramos a relação de dispersão para energias acima e abaixo da altura da barreira na respectiva super-rede semicondutora. Estruturas semicondutoras fabricadas a partir de heteroestruturas GaAs/Ga_{1-c}Al_cAs/GaAs (onde c corresponde a concentração de dopagem) tem recebida considerável atenção devido à habilidade de mudança na estrutura de bandas e parâmetros de rede em compostos semicondutores do tipo III-V.

Com o objetivo de entender o comportamento eletrônico e até mesmo no espectro óptico das super-redes, é essencial calcular sua estrutura de bandas. Baseado no que discutimos anteriormente relacionado ao modelo Kronig-Penny e o método da matriz de transferência, calculamos a estrutura de bandas para uma super-rede usando o teorema de Bloch, como pode ser visto na Fig. 18. Plotamos a dependência do vetor de onda (K) da energia do elétron incidente para diferentes valores da barreira de potencial: 5, 10, 15 e 20 elétron-volts. Variando a altura da barreira, pode simular a mudança de concentração de um dado material em uma heteroestrutura. Por questões de simplicidade, iremos considerar que altura das barreiras serão modificadas em toda a estrutura. Uma modificação de concentração em uma dada camada de uma heteroestrutura também pode ser realizada de modo a simular situações mais realistas, como trazidas por Shokri (2014).

Podemos notar que a estrutura de bandas eletrônica da super-rede se torna mais plana, com *gaps* mais amplas (*stopband*) são formadas à medida que a altura da barreira (que equivale a concentração de material semicondutor na camada) aumenta. Isso indica que a super-rede tende a um comportamento isolante conforme essa concentração aumenta. Esse fenômeno pode ser explicado pela queda dos elétrons na super-rede no poço quântico, resultando na criação de estados ligados dentro dele. Consequentemente, os elétrons ficam localizados e os transportadores de tunelamento se tornam infinitos na estrutura com o aumento da concentração de material semicondutor. Esses resultados são consistentes com

Figura 18 – Estrutura de bandas de super-rede simétrica com diferentes para diferentes valores da barreira de potencial: 5, 10, 15 e 20 eV.



Fonte: Autoria própria.

o trabalho de Shen e Cao (2003), que estudaram a célula unitária de multicamadas nas super-redes com um valor fixo de altura da barreira de potencial.

Estes resultados são importantes para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos como diodos e transistores, que dependem do controle da passagem de corrente elétrica através de heteroestruturas. Além disso, destacamos também sua relevância para o ensino de física, fornecendo uma compreensão mais profunda da teoria de tunelamento quantizado e suas implicações práticas.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em suma, desenvolvemos códigos de simulação em *python* para calcular e entender os efeitos de transmissão quantizada em um sistema composto de um número N arbitrários de barreiras retangulares assim como o caso particular de uma super-rede ($N \rightarrow \infty$). Primeiramente, utilizamos o código descrito na seção 4.2 para simular o comportamento de um elétron atravessando uma barreira simples. Em seguida, estendemos o código (descrito na seção 4.3) para simular o comportamento de um elétron atravessando um sistema composto por N barreiras idênticas com a possibilidade de incluir o efeito da sua massa efetiva.

Os resultados obtidos mostraram que a modificação do número de barreiras, sua altura e largura pode desempenhar um papel importante nas propriedades de transmissão eletrônica que são importantes tanto do ponto de vista fundamental da física quântica como em aplicações práticas voltadas para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos. Além disso, foi possível observar que o efeito da massa efetiva da partícula deve ser considerado na modelagem de heteroestruturas, pois afeta a transmissão quantizada. Isso foi demonstrado através da comparação dos resultados obtidos com o código da seção 4.2, que não considera a massa efetiva, com os resultados obtidos com o código da seção 4.3, que considera a massa efetiva.

Todos os resultados apresentados são consistentes com o que é esperado teoricamente e como o que se tem na literatura. Isso sugere que os códigos de simulação desenvolvidos neste trabalho são eficazes para modelar o comportamento de um elétron interagindo com uma heteroestrutura. Possíveis aplicações práticas dos resultados obtidos aqui incluem o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos como diodos e transistores, que utilizam heteroestruturas para controlar a passagem de corrente elétrica. Ao compreender melhor como a alteração do potencial da barreira afeta a transmissão quantizada, é possível desenvolver dispositivos mais eficientes e precisos. Além disso, o estudo da transmissão quantizada em heteroestruturas pode ser aplicado em outras áreas, como a ciência da computação, onde a transmissão quantizada é utilizada em dispositivos lógicos quânticos.

Assim, além de ser um assunto de interesse para pesquisadores e profissionais da área de tecnologia, o estudo da transmissão quantizada em heteroestruturas também pode ser útil no ensino de física. A compreensão desse fenômeno pode ajudar os estudantes a entender conceitos fundamentais da física quântica, como a natureza dual da matéria e a interação da partícula com o potencial, uma vez que existe uma carência na literatura básica na discussão de tais assuntos. A utilização de códigos de simulação permite que os estudantes visualizem e experimentem os efeitos da alteração do potencial da barreira de maneira mais concreta, o que pode ajudar a fixar os conceitos teóricos de maneira mais

eficaz. Além disso, a possibilidade de comparar os resultados obtidos com a teoria pode ajudar os estudantes a compreender melhor o fenômeno e a desenvolver suas habilidades de pensamento crítico.

Como proposta de trabalhos futuros, estamos ampliando os códigos desenvolvidos para serem aplicadas em outros perfis de potencial, tais como em potenciais parabólicos que estão mais próximos de resultados experimentais. A inclusão de campos externos (elétrico e magnético) também pode ser explorado para obter resultados ricos e mais direcionados para aplicações práticas.

REFERÊNCIAS

- ALFEROV, Z. I. Nobel lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 73, n. 3, p. 767, 2001.
- ALMEIDA, G.; LIMA, L.; DAVID, P. A teoria da aprendizagem significativa e o ensino de orbitais atômicos: Uma revisão sistemática da literatura. *Research, Society and Development*, v. 11, p. e584111032289, 2022.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid state physics*. Boston: Cengage Learning, 2022.
- BONILLA, M. A. R. Construcción de explicaciones sobre la cuantización de la energía del átomo a partir del estudio de la espectroscopía en la escuela secundaria. Universidad Pedagógica Nacional, 2022.
- BORDINI, A. et al. Pensamento computacional nos ensinos fundamental e médio: uma revisão sistemática. In: *Brazilian Symposium on Computers in Education (Simpósio Brasileiro de Informática na Educação-SBIE)*. Recife: SBC Open Library, 2017. v. 28, n. 1, p. 123.
- BRASIL. *Base Nacional Comum Curricular. Educação é Base – Ensino Médio*. Brasília, DF, 2018. Disponível em: <http://basenacionalcomum.mec.gov.br/images/historico/BNCC_EnsinoMedio_embaixa_site_110518.pdf>.
- CARMONA, A. G.; BARBERO, L. R. et al. Razones didácticas y epistemológicas de la introducción de nociones de física de semiconductores en educación secundaria. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, 4 (3), 1-16, 2005.
- CASKURLU, S. et al. Professional development as a bridge between teacher competencies and computational thinking integration. In: *Computational Thinking in Education*. Abingdon: Routledge, 2021. p. 136–150.
- CHIQUITO, V. N. M. et al. Transistores: componente inovador en la electrónica. *UNESUM-Ciencias. Revista Científica Multidisciplinaria*. ISSN 2602-8166, v. 6, n. 3, p. 13–19, 2022.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2020. v. 1.
- CONCHETI, A. F.; REIS, R. C.; LYRA, K. T. Aspecto motivacional para trabalhar o desenvolvimento do pensamento computacional em distintos cenários de aprendizagem: uma proposta no contexto do ensino de física. *Anais dos Trabalhos de Conclusão de Curso. CAE-ICMC-USP*, v. 1, 2022.
- DATTA, S. *Quantum phenomena*. 1. ed. Indiana: Addison Wesley Publishing Company, 1989. v. 8.
- DAVIES, J. H. *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. v. 1.

- ESAKI, L.; TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, IBM, v. 14, n. 1, p. 61–65, 1970.
- FELIPE, P. et al. Física computacional aplicada no ensino de física nuclear. *Blucher Physics Proceedings*, v. 1, n. 2, p. 39–40, 2014.
- FERRY, D. *Quantum mechanics: an introduction for device physicists and electrical engineers*. 3. ed. New York: CRC Press, 2020. v. 1.
- FERRY, D.; GOODNICK, S. *Transport in Nanostructures*, Cambridge Univ. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. v. 1.
- GEZERLIS, A. *Numerical Methods in Physics with Python*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2020. v. 1.
- GRAHN, H. T. *Semiconductor superlattices: growth and electronic properties*. 1. ed. Singapore: World Scientific, 1995. v. 1.
- GRECA, I. M.; MOREIRA, M. A. Uma revisão da literatura sobre estudos relativos ao ensino da mecânica quântica introdutória. *Investigações em ensino de ciências. Porto Alegre*, v. 6, n. 1, p. 29–56, 2001.
- GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. *Introduction to quantum mechanics*. 2. ed. Cambridge: Cambridge university press, 2018. v. 1.
- HARRISON, P.; VALAVANIS, A. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. 4. ed. United Kingdom: John Wiley & Sons, 2016. v. 1.
- KHINE, M. S. *Computational thinking in the stem disciplines: Foundations and research highlights*. 1. ed. Bentley: Springer, 2018. v. 1.
- KILBY, J. S. Semiconductor solid circuits. *Electronics*, v. 32, n. 11, p. 110–111, 1959.
- KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora, 2006. v. 1.
- KRONIG, R. d. L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the royal society of London. series A, containing papers of a mathematical and physical character*, The Royal Society London, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931.
- KUENZER, A. Z. A formação de professores para o ensino médio: velhos problemas, novos desafios. *Educação & Sociedade*, SciELO Brasil, v. 32, p. 667–688, 2011.
- LEVI, A. F. J. *Applied quantum mechanics*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. v. 1.
- MACLEOD, D. M. et al. Gwpy: A python package for gravitational-wave astrophysics. *SoftwareX*, Elsevier, v. 13, p. 100–657, 2021.
- MARTINS, I. P. Formação inicial de professores de física e química sobre a tecnologia e suas relações sócio-científicas. *Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias*, v. 2, n. 3, p. 293–308, 2003.

- MOREIRA, M. A. Uma análise crítica do ensino de física. *Estudos avançados*, SciELO Brasil, v. 32, n. 94, p. 73–80, 2018.
- MORUZZI, G. *Essential Python for the Physicist*. 1. ed. Pisa: Springer, 2020. v. 1.
- MÜLLER, T. S. *A Evolução dos modelos atômicos e a estrutura da matéria: uma revisão sistemática das estratégias para o ensino da Química nos anos finais do Ensino Fundamental*. Monografia (Graduação) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Rio Grande do Sul, 2022.
- OLIVEIRA, Â. A. S. d. et al. *Simulações computacionais no ensino de Física: contribuições da Filosofia da tecnologia à alfabetização científica e tecnológica*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Goiás - UFG, Goiás, 2022.
- PUJOL, O.; CARLES, R.; PÉREZ, J.-P. Quantum propagation and confinement in 1d systems using the transfer-matrix method. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 35, n. 3, p. 035025, 2014.
- RAMALHO, L. *Python Fluente*. 2. ed. São Paulo: Novatec, 2022. v. 1.
- SAABITH, A. S.; FAREEZ, M.; VINOTHRAJ, T. Python current trend applications-an overview. *International Journal of Advance Engineering and Research Development*, v. 6, n. 10, p. 6–12, 2019.
- SAVIANI, D. Formação de professores no brasil: dilemas e perspectivas. *Poíesis Pedagógica*, v. 9, n. 1, p. 07–19, 2011.
- SHEN, M.; CAO, W. Electronic band-structure engineering of GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well superlattices with substructures. *Materials Science and Engineering: B*, Elsevier, v. 103, n. 2, p. 122–127, 2003.
- SHOKRI, A. Electrical transport engineering of semiconductor superlattice structures. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, v. 438, p. 13–16, 2014.
- SOUZA, R. da S.; SILVA, I. L.; TEIXEIRA, E. S. Ensino de mecânica quântica na licenciatura em física por meio da história e filosofia da ciência. *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), v. 38, n. 2, p. 914–944, 2021.
- TETA, A. *A Mathematical Primer on Quantum Mechanics*. 1. ed. Rome: Springer, 2018. v. 1.
- TSU, R.; ESAKI, L. Tunneling in a finite superlattice. *Applied Physics Letters*, American Institute of Physics, v. 22, n. 11, p. 562–564, 1973.
- WALKER, J. S.; GATHRIGHT, J. A transfer-matrix approach to one-dimensional quantum mechanics using mathematica. *Computers in Physics*, American Institute of Physics, v. 6, n. 4, p. 393–399, 1992.

Anexos

ANEXO A – CÓDIGOS - MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA - BARREIRA SIMPLES

```

"""
Nome do Projeto: Barreira Potencial Unidimensional
Autor: Tiago da Silva Costa
Data: 20/01/2023

Este programa calcula a matriz de transferência para uma partícula
↪ atravessando uma barreira potencial unidimensional.
"""

import numpy as np
from numpy.lib.scimath import sqrt
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import linalg
from scipy import optimize

def transfer_matrix(E, V, L, V0):
    """
    Calcula a matriz de transferência para uma partícula
    incidente sobre uma barreira potencial unidimensional.

    Parâmetros:
        E (float): energia da partícula incidente
        V (numpy array): valores das etapas potenciais
        L (numpy array): comprimentos dos passos potenciais
        V0 (float): valor do potencial fora da barreira

    Retorna:
        matriz_de_transferencia (numpy array): matriz de transferência
    """
    assert len(V) == len(L)
    N = len(L)
    V = np.append(V, V0) # Anexar V0 ao final de V para uso no loop for
    # calcule a matriz de valores:
    k = sqrt(E - V) # observe que k pode ser complexo

    # calcule o primeiro salto potencial de V0 para V[0], ou seja, de fora
    # para a primeira etapa potencial usando a matriz combinada resolvida
    # ↪ à mão:
    transfer = 0.5 * np.array([[1.0 + k[-1] / k[0], 1 - k[-1] / k[0]],
                               [1 - k[-1] / k[0], 1 + k[-1] / k[0]]])
    # k[-1] é o último elemento na matriz k que é sqrt(E - V0), ou seja,
    # ↪ o valor
    # de k na região externa

```

```

#Percorra o restante das N etapas começando com uma tradução
#através do espaço ocupado por V1, ou seja, ao longo do comprimento L1
for n in range(N):
    # traduzir em V[n]:
    transl = np.array([[np.exp(1j * k[n] * L[n]), 0],
                      [0, np.exp(-1j * k[n] * L[n])]])
    # saltar de V[n] para V[n + 1]:
    jump = 0.5 * np.array([[1.0 + k[n] / k[n + 1], 1 - k[n] / k[n + 1]],
                          [1 - k[n] / k[n + 1], 1 + k[n] / k[n + 1]]])
    # agora calcule o restante da matriz de transferência anexando
    # as outras multiplicações de matrizes na frente da corrente
    # matriz de transferência:
    transfer = np.dot(transl, transfer)
    transfer = np.dot(jump, transfer)

return transfer

E = np.linspace(1e-5, 70, 700) # intervalo de E a ser usado
V = np.array([10])
L = np.array([2])
V0 = 0
T = np.zeros(len(E)) # transmissão

# amostra sobre todos os valores de E, exceto no caso de E=V:
for i in range(len(E)):
    M = transfer_matrix(E[i], V, L, V0) # calcular a matriz de
    ↪ transferência para o respectivo E
    T[i] = abs(linalg.det(M) / M[0, 0]) ** 2 # transmissão

plt.rc('text', usetex=True)
plt.rc('axes', labelsz=16)
plt.figure(figsize=(10,10),tight_layout=True ,dpi=120)
plt.plot(E, T, 'y')
plt.xlabel(r'$E$')
plt.xticks(np.arange(min(E), max(E)+1, 10))
plt.ylabel(r'$T(E)$')
plt.grid(linestyle='--', alpha=0.4)
plt.tick_params(axis='both', labelsz=11)
plt.show()

```

ANEXO B – CÓDIGOS - MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA - N BARREIRAS

```

"""
Nome do Projeto: Barreira Potencial Unidimensional
Autor: Tiago da Silva Costa
Data: 20/01/2023

Este programa calcula a transmissão de uma partícula
através de uma barreira potencial unidimensional composta
por várias barreiras.
"""

import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from tqdm import tqdm #pacote para mostrar o progresso do loop

#Número de Barreiras
nbarreiras = int(input('\033[34mDigite o número de barreiras: \033[m'))
bx = 1e-9 #largura da barreira
wx = 4e-9 #largura do poço
V0 = 10

N = (2*nbarreiras)
dL = np.zeros([N+1,1])
V = np.zeros([N+1,1])

#Discretização do espaço
for j in range(0, (2*nbarreiras), 2):
    dL[j] = wx
    V[j] = 0
    dL[j+1] = bx
    V[j+1] = V0

dL[N] = wx
V[N] = 0

# Constantes
Emin=np.pi*1e-5
Emax=60
npontos= 1500
dE=Emax/npontos
hbar=1.05457159e-34
eye=complex(0.,1.)

```

```

m0=9.109382e-31
meff= 1.0
m=meff*m0
echarge = 1.6021764e-19

E = np.ones([npontos,1])
k = np.ones([N+1,1], dtype = "complex_")
p = np.complex64([[0.,0.],[0.,0.]])
Trans= np.zeros([npontos,1])

# Geração das matrizes E, k, p, bigP e Trans
for j in tqdm(range(1,npontos+1)):
    E[j-1] = dE*j+Emin
    bigP = np.identity(2)

    for i in range(0,N+1):
        k[i] = np.sqrt(complex(2*echarge*m*((E[j-1]-V[i])))) / hbar

    for n in range(0,N):
        p[0][0] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[0][1] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(-eye*k[n]*dL[n])
        p[1][0] = 0.5*(1-k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        p[1][1] = 0.5*(1+k[n+1]/k[n])*np.exp(eye*k[n]*dL[n])
        bigP = np.matmul(bigP, p)

    Trans[j-1] = (abs(1/bigP[0][0]))**2

# Detalhes da plotagem
Vp = [ ]
for element in zip(V, V):
    Vp.extend(element)

xcell=bx+wx
deltax=xcell/1000

x0 = [wx-deltax, wx, xcell-deltax, xcell]
x1= [wx-deltax, wx, xcell-deltax, xcell]

x2 = x1+[i+j*xcell for i in x0 for j in range(1,nbarreiras) ]

x2 = np.sort(x2)
x2 = np.append(x2, (nbarreiras+1)*xcell)
x2 = np.append(0, x2)
numer = len(x2)

plt.rc('text', usetex=True)
plt.rc('axes', labelsz=16)

```

```
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, tight_layout=True, dpi=120)
ax1.plot(x2, Vp, 'c')
ax1.set_ylim(0, Emax)
ax1.set_xlabel(r'$x$ (m)')
ax1.set_ylabel(r'$V$ (eV)')
ax1.grid(linestyle='--', alpha=0.4)
ax2.plot(Trans, E, 'lime')
ax2.set_ylabel(r'$E$ (eV)')
ax2.set_xlabel(r'$T$')
ax2.set_ylim(0, Emax)
ax2.grid(linestyle='--', alpha=0.4)

ax1.tick_params(axis='both', labelsize=11)
ax2.tick_params(axis='both', labelsize=11)
plt.show()
```