



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA**

EURICO EDVAL SIVA ARAUJO NETO

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE DUAS ABORDAGENS DO MODELO
DE KRONIG-PENNEY**

REDENÇÃO - CE

2023

EURICO EDVAL SILVA ARAUJO NETO

ESTUDO COMPARATIVO ENTRE DUAS ABORDAGENS DO MODELO DE
KRONIG-PENNEY

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Licenciado em Física. Área de concentração: Física.

Orientador(a): Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena

REDENÇÃO - CE

2023

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Neto Araujo, Eurico Edval Silva.

A663e

Estudo comparativo entre duas abordagens do modelo de Kronig-Penney / Eurico Edval Silva Araujo Neto. - Redenção, 2023.
50f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto De Ciências Exatas E Da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2023.

Orientadora: Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena.

1. Física - Bandas de energias. 2. Modelo de Kronig-Penney. 3. Superredes de Semicondutores. 4. Teoria de Bloch. I. Título

CE/UF/Dsibiuni

CDD 530.70285

EURICO EDVAL SILVA ARAUJO NETO

ESTUDO COMPARATIVO ENTRE DUAS ABORDAGENS DO MODELO DE
KRONIG-PENNEY

Monografia apresentada ao Curso de
Licenciatura em Física do Instituto
de Ciências Exatas e da Natureza da
Universidade da Integração Internacio-
nal da Lusofonia Afro-Brasileira, como
parte dos requisitos necessários para a
obtenção do título de Licenciado em
Física.
Área de concentração: Física.

Trabalho aprovado. Redenção, Ceará, 2023:

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 SILVIA HELENA ROBERTO DE SENA
Data: 12/12/2023 11:49:41-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena (Orientadora)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Documento assinado digitalmente
 ARISTEU ROSENDO PONTES LIMA
Data: 12/12/2023 11:47:08-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Documento assinado digitalmente
 JOAO PHILIPPE MACEDO BRAGA
Data: 12/12/2023 18:29:04-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

A todos aqueles que me ajudaram a chegar
até aqui.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por todo dia me dar forças em minha caminhada.

Agradeço à minha família que me auxiliou em minha jornada, destacando minha mãe, Karla Patrícia Arruda Lima, que desde o início sempre me motivou a estudar para alcançar um futuro melhor, meu pai, Denesson Queiroz Araujo, que sempre me apoiou em minhas escolhas e me ensinou a saber um pouco de tudo para encarar a vida, minha irmã, Isadora Lima Araujo, que junto a minha mãe e meu avô, Eurico Edval Silva Araujo, não mediram esforços para me auxiliar a me manter em Redenção.

Agradeço aos meus professores, que contribuíram para minha formação. Destaco agradecimento especial ao Prof. Dr. Michel Lopes Granjeiro que sempre estava presente para escutar nossa turma e auxiliar no que fosse preciso, ao Prof. Dr. Aurélio Wildson Teixeira de Noronha por sua compreensão e vontade de ajudar, e aos professores Dr. João Philipe Macedo Braga e Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima, por aceitarem fazer parte da banca avaliadora.

Gostaria de expressar minha profunda gratidão à minha orientadora Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena pela confiança depositada em mim e pela paciência e compreensão durante todo processo de orientação. Ficava bastante em dúvida em quem chamar para me orientar e quando me deparei com a sua pessoa, as dúvidas sumiram e a decisão foi certa. Faço as palavras de sua antiga orientanda, Emília De Sousa, as minhas, “encontro em minha orientadora uma mulher forte e inteligente capaz de conquistar o que desejar”.

Sou extremamente grato à minha turma, Alexsandra Alves Moura, Francisco Saullo Lima Silva, Larysse Maria Santiago De Castro, Levi Silva De Oliveira, Luiz Davi Duarte Serafim, Mateus Mussunda Landa e Raphael Nicolas Domingos Maia, por encararem comigo toda essa loucura que foi a graduação. Se não fosse por eles, garanto que não estaria aqui.

Dedico um agradecimento especial à minha namorada, Maria Emile de Souza Silva, por sempre estar ao meu lado e disposta a me escutar.

Agradeço também aos meus amigos de Canindé por sempre estarem comigo independente do que ocorresse e agradeço aos novos amigos que formei nessa jornada em Redenção, suas presenças em minha vida tornaram os dias mais divertidos.

“A vida é como um game, cheia de fases e etapas.” (Player Tauz)

RESUMO

O estudo das propriedades eletrônicas de materiais é uma área fundamental da Física do estado sólido que desempenha um papel crucial no desenvolvimento da tecnologia moderna. Quando estudamos os comportamentos de elétrons em sólidos cristalinos, deparamo-nos com o conceito central de bandas de energias. As propriedades dessas bandas e seu entendimento possibilitou a criação da eletrônica moderna. O modelo original de Kronig-Penney [1] é um método amplamente empregado para calcular essas bandas em sólidos cristalinos com potenciais periódicos. Este modelo enfatiza a importância da teoria de Bloch na compreensão do comportamento dos elétrons em redes cristalinas, simplificando o tratamento teórico. Em contrapartida, o trabalho de Hung-Sik Cho e Paul R. Prucnal [2] busca simplificar e ampliar a descrição de super-redes de semicondutores, motivado pela necessidade da melhor compreensão desses sistemas. Esse formalismo alternativo, baseado em propriedades de simetria das funções de onda, surge como uma alternativa valiosa à abordagem de Kronig e Penney. Buscando aprofundar a compreensão das diferenças conceituais e metodológicas entre esses dois modelos, realizamos um estudo comparativo detalhado dos dois procedimentos usados na determinação das bandas de energia, enfatizando as vantagens de cada abordagem. Vale resaltar que este estudo comparativo não está presente nos livros-texto tradicionais, de forma que este trabalho tem o potencial de contribuir para o ensino de física do estado sólido.

Palavras-chave: Bandas de energias. Modelo de Kronig-Penney. Superredes de Semicondutores. Teoria de Bloch.

ABSTRACT

The investigation of electronic properties of materials stands as a fundamental domain within the realm of Solid State Physics, playing a central role in the advancement of modern technology progress. Exploring the behaviors of electrons in crystalline solids leads us to the central concept of energy bands. The comprehension of these bands and their properties has underpinned the development of modern electronics. The original Kronig-Penney model [1] remains a widely employed method for computing these bands in crystalline solids with periodic potentials. This model underscores the significance of Bloch theory in understanding electron behavior in crystal lattices, offering a simplified theoretical treatment. Conversely, the work of Hung-Sik Cho and Paul R. Prucnal [2] seeks to streamline and broaden the description of semiconductor superlattices, driven by the necessity for a better understanding of these systems. This alternative formalism, rooted in the symmetry properties of wave functions, emerges as a valuable alternative to the Kronig-Penney approach. Pursuing a deeper understanding of conceptual and methodological differences between these two models, we conduct a detailed comparative study of the two procedures used in determining energy bands, emphasizing the advantages of each approach. It is worth to mention that this comparative study is not present in traditional textbooks, which enhances the value of the work for physics education.

Keywords: Energy bands. Kronig-Penney Model. Semiconductor Superlattices. Bloch's Theory.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – (a) Rede cristalina cúbica simples e seus vetores primitivos, retirada da Ref. [4]. (b) Célula unitária cúbica simples, retirada da Ref. [8]	12
Figura 2 – Ilustração esquemática da formação de bandas de energia retirado da Ref. [4]	14
Figura 3 – Visão esquemática de uma sucessão periódica de poços quadrados finitos, onde a é a espessura do poço, b é a espessura da barreira, e V_0 é a altura da barreira. Fonte: Próprio autor.	22
Figura 4 – Diagrama de bandas do modelo de Kronig-Penney, onde a curva preta é plotada a partir do lado esquerdo da Eq. (2.58) e a curva vermelha tracejada a partir do lado esquerdo da Eq. (2.68). Essas equações do lado citado são representadas por $f(E)$ e a primeira curva, é referente a uma sequência de barreiras de larguras 2,5nm separadas por poços de 10nm de largura. A altura das barreiras é 100meV. A curva tracejada vermelha é para o caso de barreiras do tipo função delta de Dirac para $P = 3\pi/2$. As bandas de energia também estão especificadas, onde as retas pretas verticais que intersectam as duas retas pretas horizontais indicam as bandas de energia para a curva preta e retas vermelhas tracejadas verticais que intersectam essas duas retas ilustram as bandas para a segunda curva.	31
Figura 5 – Visão esquemática de uma sucessão periódica de pontos espaçados com distâncias múltiplas de a , conhecido como rede de Dirac unidimensional, contendo a função de onda ψ_I da região I , intervalo de $0 < x < a$, e ψ_{II} da região II , intervalo de $-a < x < 0$. Fonte: Próprio autor.	33
Figura 6 – Visão esquemática de uma sucessão periódica de poços quadrados finitos similar a Figura 3, no entanto, mostrando as funções de ondas presentes nos poços, ψ_a e ψ_c , e barreiras, ψ_b e ψ_d . Fonte: Próprio autor.	38
Figura 7 – Gráfico retirado da Ref. [2] que ilustra as primeiras cinco subbandas de energia de elétrons de uma superrede GaAs/Al _x Ga _{1-x} As, com parâmetros $x = 0,5$, $a = 100\text{\AA}$, $b = 25\text{\AA}$, e $V = 375\text{meV}$. n é o índice de banda. As curvas tracejadas (a) e (b) correspondem às funções no lado esquerdo das Eqs. (3.37) e (3.43), e (3.48) e (3.51), respectivamente. Já as curvas pontilhadas (c) e (d) correspondem às funções no lado esquerdo das Eqs. (3.54) e (3.57), e (3.60) e (3.63), respectivamente. A curva sólida (e) corresponde ao lado esquerdo das Eqs. (3.1) e (3.2).	46

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	9
1 INTRODUÇÃO	11
1.1 Teorema de Bloch	15
1.2 Forma alternativa do teorema de Bloch	19
1.3 Um formalismo alternativo para o modelo de Kronig-Penney .	21
2 FORMALISMO CONVENCIONAL DO MODELO DE KRONIG-PENNEY	22
2.1 Desenvolvimento matemático do modelo de Kronig-Penney . .	22
2.1.1 Modelo de Kronig-Penney considerando um potencial Delta de Dirac	32
3 DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO DO FORMALISMO ALTERNATIVO PARA O MODELO KRONIG-PENNEY . . .	37
3.1 formalismo alternativo do modelo de Kronig-Penney	37
3.1.1 Bandas de índice ímpar ($n=1,3,5,\dots$)	40
3.1.2 Bandas de índice par ($n=2, 4, 6,\dots$)	43
4 CONCLUSÕES	47
REFERÊNCIAS	48

1 INTRODUÇÃO

A história da Eletrônica pode ser rastreada até o desenvolvimento do primeiro diodo de tubo a vácuo por John Ambrose Fleming, em 1904, que permitiu o controle do fluxo de corrente elétrica [3]. Em seguida, a invenção do transistor em 1947 por John Bardeen, Walter Brattain e William Shockley, representou um marco fundamental, possibilitando a miniaturização e o desenvolvimento de circuitos eletrônicos mais eficientes [4]. Esses avanços foram fundamentais para a criação dos primeiros computadores e para o desenvolvimento subsequente da tecnologia da informação.

No cenário contemporâneo, a Eletrônica é um pilar fundamental da tecnologia e inovação. Seus princípios e dispositivos permeiam uma infinidade de aplicações, desde comunicações e processamento de dados até medicina e engenharia aeroespacial [5]. Ela tem um papel crucial na nossa vida diária, sendo responsável por avanços como smartphones, computadores pessoais e a Internet das Coisas (IoT), que conecta bilhões de dispositivos ao redor do mundo, facilitando a comunicação e a troca de informações em tempo real [6]. Olhando para o futuro, podemos esperar avanços significativos em várias áreas da Eletrônica. A nanotecnologia, por exemplo, promete revolucionar a forma como os dispositivos eletrônicos são fabricados, tornando-os menores, mais rápidos e mais eficientes [7].

A evolução da eletrônica está profundamente ligada ao entendimento e manipulação de propriedades de materiais em escala atômica, um campo abordado pela física do estado sólido. A compreensão de como os elétrons se comportam em sólidos foi fundamental para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos, desde os primeiros diodos até os transistores de efeito de campo utilizados em circuitos integrados modernos [4]. A física do estado sólido é uma área da física que estuda as propriedades e comportamentos dos sólidos cristalinos, onde os átomos estão organizados em padrões regulares e repetitivos que se estende em todas as três dimensões espaciais. Essa organização é conhecida como rede cristalina. Cada ponto dessa rede representa a posição de uma entidade que se repete periodicamente, formando o que chamamos de célula unitária. Ela, por sua vez, é a menor unidade de um cristal que retém suas propriedades características e, ao se repetir, constrói toda a estrutura cristalina [8]. A Fig. (1a) mostra o exemplo de uma rede cristalina, a cúbica simples e a Fig. (1b), ilustra a célula unitária que compõe essa rede.

O estudo dos sólidos tem uma longa história, que remonta à antiguidade, quando os filósofos gregos começaram a especular sobre a natureza da matéria [9]. No entanto, foi apenas no século XIX que ele começou a se desenvolver de forma mais sistemática, com o advento da termodinâmica e da teoria cinética dos gases. Essas teorias permitiram aos cientistas começar a entender como os átomos e moléculas se comportam em diferentes estados da matéria. No início do século XX, o desenvolvimento da mecânica quântica

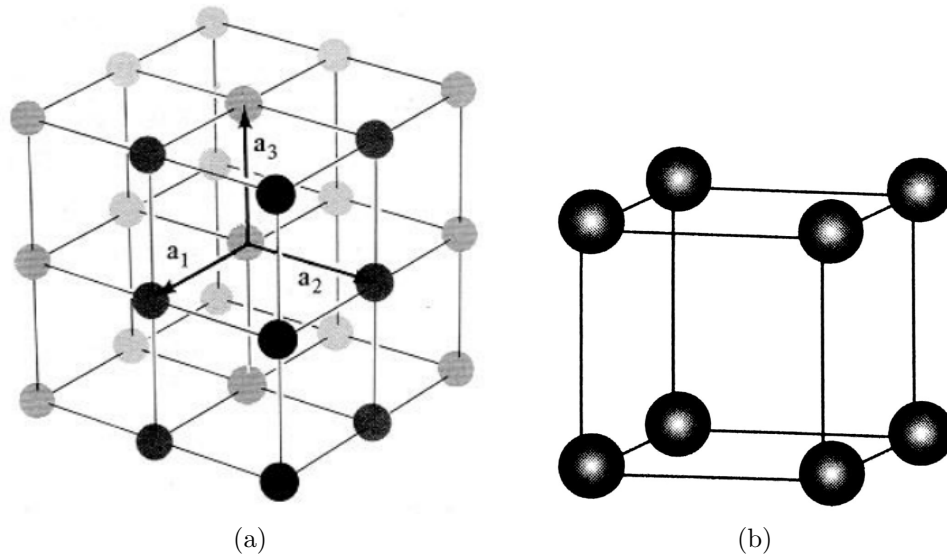


Figura 1: (a) Rede cristalina cúbica simples e seus vetores primitivos, retirada da Ref. [4]. (b) Célula unitária cúbica simples, retirada da Ref. [8]

e da teoria da relatividade trouxe uma nova compreensão sobre a natureza dos sólidos. A mecânica quântica, em particular, foi essencial para o desenvolvimento da teoria das bandas de energia, que é a base para a compreensão de muitas propriedades dos sólidos, como a condutividade elétrica e o magnetismo[8] [9] [10].

Dentro desse cenário, é interessante notar como a organização cristalina influencia diretamente as propriedades eletrônicas e magnéticas dos materiais. A estrutura regular e simétrica dos cristais permite que os elétrons se movam de maneira organizada através do sólido [8]. As redes cristalinas são classificadas de acordo com a simetria e a forma geométrica da célula unitária. Existem sete sistemas cristalinos básicos e quatorze tipos de redes de Bravais. Uma rede de Bravais é um conjunto infinito de pontos discretos gerados pela repetição de um conjunto de vetores de base, de forma que a disposição dos pontos é idêntica, independentemente do ponto de observação. Em outras palavras, se você estiver em um ponto da rede e se mover para outro ponto, a disposição deles ao seu redor parecerá exatamente a mesma. É importante notar que ela descreve apenas a disposição geométrica dos pontos no espaço, e não leva em conta a presença de átomos ou moléculas nos pontos da rede. O conjunto de pontos da rede de Bravais juntamente com a disposição dos átomos ou moléculas nos pontos da rede forma a estrutura cristalina do material [4] [8].

Uma vez que a simetria de translação dos sólidos cristalinos têm uma influência direta em suas propriedades físicas, a manipulação e combinação de materiais diferentes em variadas geometrias abre um enorme leque de possibilidades no que diz respeito à fabricação de nanoestruturas com características desejadas. Dentro desse contexto, uma estrutura de grande interesse científico e tecnológico são as super-redes cristalinas, que são estruturas formadas pela repetição periódica de diferentes materiais cristalinos em escala

nanométrica, podendo ser semicondutores, metais ou isolantes, criando uma nova simetria que não é encontrada na natureza. Esta combinação resulta em um padrão singular, caracterizado por sua periodicidade e precisão no empilhamento das camadas. Essas características conferem às elas propriedades únicas, advindas do confinamento quântico e da interação entre os diferentes materiais, resultando em fenômenos físicos inovadores e atributos aprimorados. A análise dessas estruturas é possível através de técnicas como difração de raios-X e microscopia eletrônica, permitindo aos pesquisadores detalhar a estrutura e as características das super-redes, além de compreender como são influenciadas pela composição e espessura das camadas. A capacidade de ajustar suas propriedades para aplicações específicas é uma das principais vantagens dessas estruturas, abrindo caminho para o desenvolvimento de novos dispositivos com funcionalidades desejáveis, que seriam inalcançáveis com materiais convencionais [4] [11] [12].

Os métodos de síntese de super-redes incluem técnicas de deposição de vapor, como a epitaxia por feixe molecular (MBE) e a deposição de vapor químico (CVD), que permitem o controle preciso da espessura e da composição das camadas. Essa síntese é um processo complexo que requer equipamentos especializados e conhecimento técnico avançado. Um exemplo específico de super-rede é a combinação de camadas alternadas de GaAs (arseneto de gálio) e AlGaAs (arseneto de gálio e alumínio), que é amplamente utilizada em dispositivos optoeletrônicos, como lasers de semicondutores e detectores de infravermelho [4] [11] [12].

Com base no entendimento das estruturas cristalinas e suas propriedades, é possível explorar o conceito de bandas de energia e sua influência nos materiais cristalinos. A teoria das bandas em cristais foi desenvolvida no início do século XX como uma forma de entender o comportamento elétrico dos sólidos. A descoberta e o desenvolvimento desta teoria estão relacionados ao advento da mecânica quântica e foram essenciais para o desenvolvimento da física do estado sólido moderna. Esse conceito é baseado na ideia de que os átomos em um sólido cristalino têm seus elétrons organizados em níveis de energia que se sobrepõem e formam bandas contínuas e são separadas por lacunas de energia, conhecidas como *band gaps* [4] [13]. A Fig. 2, ilustra como a aproximação dos átomos em um sólido contribui para essa formação.

Os materiais podem ser classificados como condutores, semicondutores ou isolantes, diferenciados pelas características de suas bandas de energia. Em condutores, como o cobre, as bandas de valência e condução se sobrepõem, permitindo que os elétrons se movam livremente e facilitem a condução de eletricidade. Exemplos comuns desses materiais incluem metais, usados amplamente em fios, cabos e componentes eletrônicos, devido à sua alta capacidade de permitir o fluxo elétrico. Por outro lado, em isolantes, como o diamante, observa-se um *band gap* substancial, nesse caso por exemplo de $5,47\text{eV}$, que restringe o movimento dos elétrons, impedindo assim a passagem de corrente elétrica.

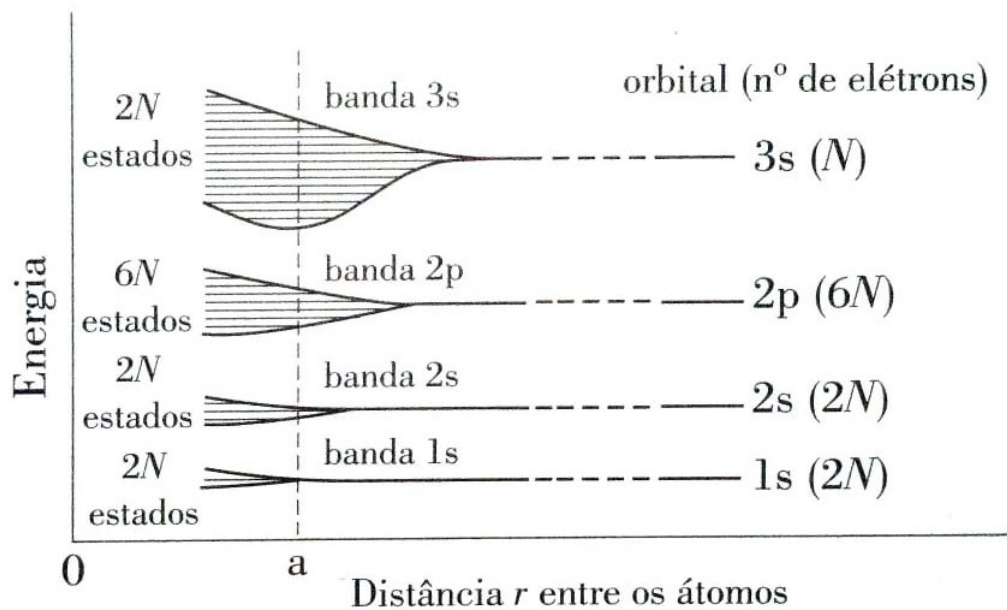


Figura 2: Ilustração esquemática da formação de bandas de energia retirado da Ref. [4]

Esses materiais são essenciais em diversas aplicações, como no isolamento elétrico e térmico, protegendo condutores e evitando curtos-circuitos. Os semicondutores ocupam uma posição intermediária, com um *band gap* moderado. Esta característica única permite que eles conduzam eletricidade sob certas condições, como a aplicação de campos externos. Além disso, a condutividade elétrica dos semicondutores pode ser significativamente alterada por meio de dopagem, tornando-os peças fundamentais em dispositivos como diodos, transistores e células solares [4] [8] [12] [14].

Em um contexto mais técnico, nos sólidos, os elétrons estão distribuídos nas bandas de energia permitidas, não existindo nos gaps. A relação entre a banda de valência e a banda de condução é crucial para determinar o comportamento elétrico do material. Em condutores, a banda de valência preenchida ou parcialmente preenchida e uma banda de condução vazia ou parcialmente vazia, com pequena ou nenhuma lacuna de energia entre elas, permitem uma grande mobilidade dos elétrons. Nos semicondutores, a presença de um pequeno gap entre estas bandas limita a condução em condições normais, mas permite aumento da condutividade sob influência de fatores externos [4] [8] [12].

Focando agora no movimento dos elétrons, compreender sua interação com barreiras de potencial em cristais é crucial para explorar o potencial de aplicações em dispositivos eletrônicos. Quando se deslocam por um cristal, podem encontrar essas barreiras, regiões de energia potencial elevada, surgindo de defeitos na rede cristalina, impurezas ou interfaces entre diferentes materiais. Estas afetam tanto o movimento dos elétrons quanto as propriedades elétricas e ópticas do material. Seu comportamento ao encontrá-las é diretamente influenciado pela estrutura de bandas de energia e é regido pelas leis da mecânica quântica, que diferem significativamente das da física clássica [15].

O Modelo de Kronig-Penney, um aprimoramento do Modelo de Elétons Quase-livres, incorpora o potencial periódico dos íons em um cristal para tratar elétrons em uma rede cristalina [12] [1], sendo fundamental para explicar a formação de bandas de energia e zonas de Brillouin em sólidos. A primeira zona de Brillouin, definida pelos planos de Bragg no espaço recíproco, representa os estados eletrônicos mais estáveis, sendo crucial na compreensão do comportamento dos elétrons em semicondutores e isolantes. Por sua vez, o espaço recíproco, uma construção matemática que representa vetores de onda, é essencial para analisar interações onda-partícula em cristais [8].

Os modelos de Elétons Quase-livres e Kronig-Penney compartilham semelhanças, como a consideração dos elétrons em um potencial gerado pelos íons, diferindo, no entanto, em termos de complexidade e aplicabilidade. O primeiro é mais simples e geralmente aplicado a metais, enquanto o segundo é mais complexo e aplicado a sólidos cristalinos, incluindo semicondutores e isolantes [15].

Desenvolvido por Ralph Kronig e William Penney em 1931, o Modelo de Kronig-Penney foi uma resposta à necessidade de explicar resultados experimentais que o modelo de elétrons livres não conseguia descrever adequadamente. Seu contexto histórico é relevante, pois ajudou a estabelecer uma base sólida para o entendimento dos sólidos cristalinos durante um período inicial de desenvolvimento da física do estado sólido. Apesar de suas limitações, como ser um modelo unidimensional e assumir um potencial periódico simples, ele é uma ferramenta valiosa para entender as propriedades eletrônicas dos sólidos, sendo aplicado em pesquisas recentes [16].

Para compreender o formalismo do modelo, é essencial conhecer o Teorema de Bloch, que descreve o comportamento das funções de onda eletrônicas sob efeito de um potencial periódico, sendo um alicerce para a compreensão das propriedades eletrônicas dos sólidos e essencial para explicar fenômenos como a condutividade elétrica e o comportamento dos semicondutores.

1.1 Teorema de Bloch

O teorema de Bloch, formulado por Felix Bloch em 1928, afirma que as funções de onda eletrônicas em um cristal periódico podem ser expressas como o produto de uma função de onda plana e uma função periódica que tem a mesma periodicidade da rede cristalina [8] [17]. Matematicamente, isso pode ser expresso como:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.1)$$

onde $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ é a função de onda eletrônica para um estado com vetor de onda $\vec{k}$, $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ é uma função de onda plana e $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função periódica com a mesma periodicidade do

cristal:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.2)$$

sendo $\vec{R}$ um vetor de rede. Quando um elétron se move em um cristal, ele "sente" um potencial periódico devido aos íons da rede. O teorema de Bloch nos diz que, apesar dessa periodicidade, podemos usar funções de onda planas, que são mais simples de lidar, para descrever o comportamento dos elétrons. Uma das principais implicações do teorema é a existência das bandas de energia permitidas e proibidas para os elétrons em um cristal, sendo consequência direta da periodicidade do potencial cristalino.

A prova do teorema inicia-se ao explorar o modo como o teorema de Bloch emerge da equação de Schrödinger através da sugestão de representações em série tanto para o potencial quanto para a função ψ . Escrevendo nossa Eq. de Schrödinger para um único elétron,

$$\hat{H}\psi = E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi. \quad (1.3)$$

Para iniciar a expansão em séries, é essencial entender as condições de contorno que as funções cumprem. Conhecemos a periodicidade da rede definida por U , porém não se pode presumir a mesma periodicidade para ψ , conforme o teorema de Bloch estabelece. Portanto, adotamos uma condição de contorno periódica conhecida como condição de Born-von Karman, que estabelece que após uma extensa sequência de células primitivas, a estrutura cristalina é considerada como reiniciando, fazendo com que ψ se repita após uma distância significativa L . Finalmente, vamos negligenciar os efeitos de superfície, dado que sua complexidade dificulta o tratamento.

Em termos matemáticos, a periodicidade em ψ assume a seguinte forma:

$$\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r}), i = 1, 2, 3, \quad (1.4)$$

onde $\vec{a}_i$ são três vetores primitivos, N_i é o número de células em uma determinada direção e $N = N_1 N_2 N_3$ o número de células primitivas em um cristal, sendo um número muito grande. Dado as seguintes expansões para substituir na equação de Schrödinger:

$$V(\vec{K}) = \sum_{\vec{K}} V_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}, \quad (1.5)$$

inclui somente vetores de onda que pertencem à rede recíproca e que atendem à condição de contorno. Para a função de onda, a expansão fica,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad (1.6)$$

como a função de onda não tem a periodicidade da rede, logo a expansão de ψ envolvem as

ondas planas que satisfazem a condição de contorno de Born-von Karman. Por enquanto, vamos considerar os q 's vetores de ondas consistente com a condição de contorno, sendo revelado apenas posteriormente quem são eles. Agora vamos substituir as Eq. (1.5) e (1.6) na (1.3), no entanto, vamos trabalhar por partes, primeiro começando com a energia cinética da equação de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(\sum_{\vec{q}}c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right) = \sum_{\vec{q}}\frac{\hbar^2}{2m}q^2c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (1.7)$$

agora a energia potencial,

$$V\psi = \sum_{\vec{K}}V_{\vec{K}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\sum_{\vec{q}}c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{K}\vec{q}}V_{\vec{K}}c_{\vec{q}}e^{i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{r}}, \quad (1.8)$$

fazendo

$$\vec{K} + \vec{q} = \vec{q}' \quad (1.9)$$

e

$$\vec{q} = \vec{q}' - \vec{K}, \quad (1.10)$$

obtemos:

$$V\psi = \sum_{\vec{K}\vec{q}'}V_{\vec{K}}c_{\vec{q}'-\vec{K}}e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}}. \quad (1.11)$$

Substituindo as Eqs. (1.7) e (1.11) na (1.3) chegamos à

$$H\psi = \sum_{\vec{q}}\frac{\hbar^2}{2m}q^2c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + \sum_{\vec{K}\vec{q}'}V_{\vec{K}}c_{\vec{q}'-\vec{K}}e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}} = E\psi. \quad (1.12)$$

Se fizermos uma troca,

$$\vec{K} \rightarrow \vec{K}' \quad (1.13)$$

e

$$\vec{q}' \rightarrow \vec{q}, \quad (1.14)$$

assim,

$$\sum_{\vec{q}}\frac{\hbar^2}{2m}q^2c_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + \sum_{\vec{K}'\vec{q}}V_{\vec{K}'}c_{\vec{q}-\vec{K}'}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = E\psi \quad (1.15)$$

reorganizando a equação e substituindo a Eq. (1.6) no lado direito,

$$\sum_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}q^2c_{\vec{q}} + \sum_{\vec{K}'}V_{\vec{K}'}c_{\vec{q}-\vec{K}'}\right) = E\sum_{\vec{q}}C_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (1.16)$$

passando tudo do lado direito para o esquerdo da equação, encontramos

$$\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - E \right) c_{\vec{q}} + \sum_{\vec{K}'} V_{\vec{K}'} c_{\vec{q}-\vec{K}'} \right] = 0. \quad (1.17)$$

Observe que a nossa equação diferencial foi transformada em uma equação algébrica, ainda assim equivalente à equação de Schrödinger original, com as incógnitas sendo os coeficientes de expansão. Para obter uma solução que não seja trivial, o termo que está dentro dos colchetes na equação acima deve ser igual a zero, da seguinte forma:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - E \right) c_{\vec{q}} + \sum_{\vec{K}'} V_{\vec{K}'} c_{\vec{q}-\vec{K}'} = 0. \quad (1.18)$$

Primeiramente, para encontrar a solução, faremos algumas manipulações de índice, seja

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}, \quad (1.19)$$

dado que $\vec{K}$ é um vetor da rede recíproca para $\vec{k}$ ficar na primeira zona de Brilloin (1^a Z.B.). Substituindo a Eq. (1.19) na (1.18), alcançamos

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{K})^2 - E \right) c_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} V_{\vec{K}'} c_{\vec{k}-\vec{K}-\vec{K}'} = 0. \quad (1.20)$$

É importante enfatizar que q's são restritos a 1^a Z.B. já que $\vec{K}$ foras, são pontos equivalentes da rede recíproca e podem ser transladada por vetores de onda da rede recíproca, o $\vec{K}$. Ainda assim,

$$\vec{K}' \rightarrow \vec{K}' - \vec{K}, \quad (1.21)$$

isso é possível já que a soma ou subtração de dois vetores da rede recíproca, resulta em um vetor também da rede recíproca, logo substituindo na Eq (1.20), encontramos

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{K})^2 - E \right) c_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} V_{\vec{K}'-\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}'} = 0. \quad (1.22)$$

Perceba que existe um conjunto de equações correspondente a cada $\vec{k}$ na 1^a Z.B., pois as equações interligam coeficientes cujos vetores de onda se diferem de $\vec{k}$ por um vetor pertencente à rede recíproca:

$$c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}-\vec{K}}, c_{\vec{k}-\vec{K}'}, c_{\vec{k}-\vec{K}''}, \dots, \quad (1.23)$$

isso nos leva ao teorema de Bloch. Na Eq. (1.6) podemos substituir a Eq. (1.19)

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{i(\vec{k}-\vec{K}) \cdot \vec{r}}, \quad (1.24)$$

onde notamos que a expansão de ψ envolve apenas os coeficientes $c_{\vec{k}-\vec{K}}$. Perceba o que acontece se colocarmos $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ em evidencia:

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(\sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} \right). \quad (1.25)$$

Agora, o termo entre parênteses representa a expansão de uma função que incorpora unicamente vetores da rede recíproca, constituindo uma função com a periodicidade da rede. Portanto:

$$u(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} \quad (1.26)$$

1.2 Forma alternativa do teorema de Bloch

Outra forma do teorema de Bloch pode ser expressa a partir das Eqs. (1.1) e (1.2):

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.27)$$

Para prova-lo vamos definir um operador de translação $\hat{T}_{\vec{R}}$ que

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R}), \quad (1.28)$$

como a Hamiltoniana é periódica, já que está submetido ao potencial periódico, temos que:

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{H} \psi = \hat{H}(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{H} \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{H} \hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}), \quad (1.29)$$

logo:

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{H} = \hat{H} \hat{T}_{\vec{R}}. \quad (1.30)$$

Ainda assim, vamos definir também que

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{T}_{\vec{R}'} \psi = \hat{T}_{\vec{R}'} \hat{T}_{\vec{R}} \psi = \psi(\vec{r} + \vec{R}' + \vec{R}) = \psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}'), \quad (1.31)$$

implicando:

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{T}_{\vec{R}'} = \hat{T}_{\vec{R}'} \hat{T}_{\vec{R}} = \hat{T}_{(\vec{R}'+\vec{R})} = \hat{T}_{(\vec{R}+\vec{R}')}. \quad (1.32)$$

Como $\hat{H}$ e $\hat{T}_{\vec{R}}$ comutam entre si, eles possuem autoestados simultaneos:

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (1.33)$$

e

$$\hat{T}_{\vec{R}}\psi = \lambda_{\vec{R}}\psi. \quad (1.34)$$

Além disso, como os operadores de translação também comutam entre si, temos que:

$$\lambda_{(\vec{R}+\vec{R}')} = \lambda_{\vec{R}}\lambda_{\vec{R}'}. \quad (1.35)$$

Isto sugere que a função $\lambda_{\vec{R}}$, quando avaliada em uma posição de rede $\vec{R}$ combinada com outra posição $\vec{R}'$, é o produto das funções avaliadas em $\vec{R}$ e $\vec{R}'$ individualmente. Considerando que $\vec{a}_i$ sejam os três vetores primitivos para a rede, a função $\lambda_{\vec{a}_i}$ é escrita como uma exponencial complexa, o que é consistente com a forma da função de onda de Bloch:

$$\lambda_{\vec{a}_i} = e^{2\pi i x_i}. \quad (1.36)$$

Ainda assim, temos que o índice do operador $\vec{R}$ pode ser escrito como

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (1.37)$$

assim, pela Eq. (1.35) o autovalor de uma soma de vetores é igual ao produto dos autovalores, logo,

$$\lambda_{\vec{R}} = \lambda_{(\vec{a}_1)^{n_1}} \lambda_{(\vec{a}_2)^{n_2}} \lambda_{(\vec{a}_3)^{n_3}}. \quad (1.38)$$

Substituindo 1.36 em 1.38:

$$\lambda_{\vec{R}} = e^{i2\pi(x_1n_1+x_2n_2+x_3n_3)}. \quad (1.39)$$

Podemos dizer que:

$$\lambda_{\vec{R}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad (1.40)$$

em que,

$$\vec{k} = x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3, \quad (1.41)$$

onde b_i são vetores da rede recíproca que obedecem

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (1.42)$$

Finalmente:

$$\hat{T}_{\vec{R}}\psi(r) = \psi(r + \vec{R}) = \lambda_{\vec{R}}\psi(r) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\psi(r). \quad (1.43)$$

Agora, revisando as condições de contorno de Born-von Karman, Eq. (1.4), temos que pelo teorema de Bloch

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + N_i\vec{a}_i) = e^{iN_i\vec{k}\cdot\vec{a}_i}\psi(r)_{n\vec{k}}, \quad (1.44)$$

a translação que ocorre deve equivaler a multiplicação por essa fase. Como as Eqs. (1.4) e

(1.44) devem ser coerentes entre si, logo:

$$e^{iN_i\vec{k}\cdot\vec{a}_i} = 1, \quad (1.45)$$

de modo que,

$$e^{2\pi i N_i x_i} = 1, \quad (1.46)$$

nos dando a seguinte condição

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad (1.47)$$

onde,

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i. \quad (1.48)$$

Sendo assim, de acordo com as condições periódicas de Born-von Karman, o vetor de onda $\vec{k}$ é quantizado de tal forma que é expresso como uma combinação linear dos vetores recíprocos da rede cristalina $\vec{b}_i$, com coeficientes que são razões de inteiros m_i e o número de células unitárias N_i na direção do vetor de rede correspondente.

1.3 Um formalismo alternativo para o modelo de Kronig-Penney

Na década de 80 do século passado, Hung-Sik Cho e Paul R. Prucnal propuseram um formalismo alternativo para o modelo de Kronig-Penney [2], oferecendo uma abordagem inovadora e mais intuitiva, focada em simplificar os cálculos para encontrar as bandas de energia e introduzindo as funções de onda de envelope nas bordas das bandas, seguindo uma lógica de paridades das funções de onda, algo não abordado pelo formalismo convencional.

Este trabalho visa fazer um estudo comparativo detalhado do formalismo original de Kronig e Penney com a abordagem proposta por Cho e Prucnal, investigando em que aspectos o método do segundo pode superar as limitações do primeiro e proporcionar uma compreensão mais profunda e completa das propriedades eletrônicas dos materiais sólidos. No capítulo 2, vamos desenvolver o formalismo convencional do modelo de Kronig-Penney para, assim, encontrar as banda de energia da super-rede. No capítulo 3, desenvolveremos o formalismo alternativo e discutiremos suas implicações. No capítulo 4, apresentamos sucintamente nossas conclusões. No âmbito deste trabalho, é crucial ressaltar que a comparação abordada não figura nos convencionais livros-texto de física.

2 FORMALISMO CONVENCIONAL DO MODELO DE KRONIG-PENNEY

Nesse capítulo iremos desenvolver matematicamente o formalismo convencional para o modelo de Kronig-Penney a partir do artigo de Kronig e Penney, utilizando do teorema de Bloch e aplicando um método desenvolvido por Ram Swaroop Meghwal para resolver o determinante complicado que encontramos no caminho. Após sua solução, a equação transcendental será utilizada para entender a geração de bandas de energias. Em seguida, abordamos um método mais simples, que utiliza de um potencial delta de Dirac e da forma alternativa do teorema de Bloch para posteriormente chegar na equação desejada, evitando o determinante complicado e chegando nas mesmas conclusões discutidas para o primeiro caso. É importante enfatizar que contas foram abertas em detalhes, permitindo uma compreensão minuciosa do processo.

2.1 Desenvolvimento matemático do modelo de Kronig-Penney

Kronig e Penney investigaram o comportamento dos elétrons em um potencial periódico utilizando um modelo relativamente simples e unidimensional. Eles assumiram que a energia potencial de um elétron poderia ser representada por uma sequência de poços quadrados separados por barreiras de potencial, conforme ilustrado na Fig. 3. O período do potencial é $d = a + b$, onde a e b são as larguras dos poços e das barreiras, respectivamente.

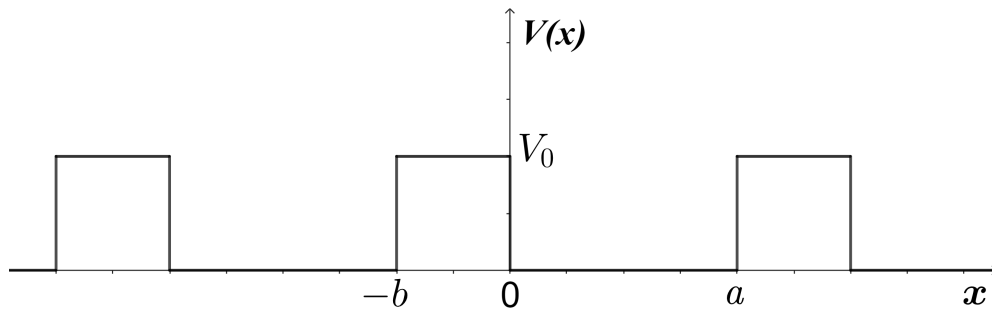


Figura 3: Visão esquemática de uma sucessão periódica de poços quadrados finitos, onde a é a espessura do poço, b é a espessura da barreira, e V_0 é a altura da barreira. Fonte: Próprio autor.

Sabe-se que para estudar o comportamento de um elétron em um potencial $V(x)$ deve-se resolver a equação de Schrödinger dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

podemos manipulá-la e deixar da seguinte forma

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \kappa^2 [E - V(x)]\psi = 0, \quad (2.2)$$

onde ψ é a função de onda do eletrôn e

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}. \quad (2.3)$$

Dado que o potencial é periódico, as soluções das equações devem assumir a forma de funções de Bloch, isto é,

$$\psi(x) = u(x)e^{i\alpha x}, \quad (2.4)$$

em que

$$\alpha = \frac{2\pi k}{L}, \quad (2.5)$$

onde k é um número inteiro qualquer, $L = G(a + b)$, onde G é um inteiro grande e $u(x)$ uma função periódica em x com o período $(a + b)$. Para a região de $-b \leq x \leq 0$ temos que $V = V_0$ e a equação de Schrödinger toma forma de

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2[E - V_0]\psi = 0, \quad (2.6)$$

e para a região $0 \leq x \leq a$ temos que $V = 0$, logo

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2 E\psi = 0. \quad (2.7)$$

Supondo que E , a energia de um eletrôn, é menor que V_0 podemos fazer com que

$$\beta = \kappa\sqrt{E}, \quad (2.8)$$

$$\gamma = \kappa\sqrt{V_0 - E}, \quad (2.9)$$

logo as Eqs. (2.6) e (2.7) tomam a seguinte forma, respectivamente:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \gamma^2\psi = 0, \quad (2.10)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta^2\psi = 0. \quad (2.11)$$

Usando o resultado de Bloch descrito pela Eq. (2.4), obtemos:

$$\frac{d^2u_1}{dx^2} + 2i\alpha\frac{du_1}{dx} - (\alpha^2 + \gamma^2)u_1 = 0, \quad (2.12)$$

$$\frac{d^2u_2}{dx^2} + 2i\alpha\frac{du_2}{dx} - (\alpha^2 - \beta^2)u_2 = 0, \quad (2.13)$$

onde u_1 e u_2 representam o valor de $u(x)$ nos intervalos $-b \leq x \leq 0$ e $0 \leq x \leq a$, respectivamente. A solução dessas equações são dadas por:

$$u_1 = Ae^{(-i\alpha+\gamma)x} + Be^{(-i\alpha-\gamma)x}, \quad (2.14)$$

$$u_2 = Ce^{i(-\alpha+\beta)x} + De^{i(-\alpha-\beta)x}, \quad (2.15)$$

em que A, B, C e D são constantes arbitrárias que podem ser determinadas pelas seguintes condições de contorno:

$$[u_1]_{x=0} = [u_2]_{x=0}, \quad (2.16)$$

$$\left[\frac{du_1}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{du_2}{dx} \right]_{x=0}, \quad (2.17)$$

$$[u_1]_{x=-b} = [u_2]_{x=a}, \quad (2.18)$$

$$\left[\frac{du_1}{dx} \right]_{x=-b} = z \left[\frac{du_2}{dx} \right]_{x=a}. \quad (2.19)$$

Aplicando essas condições de contorno nas Eqs. (2.14) e (2.15), iremos obter,

$$A + B = C + D, \quad (2.20)$$

$$(-i\alpha + \gamma)A + (-i\alpha - \gamma)B = i(-\alpha + \beta)C + i(-\alpha - \beta)D, \quad (2.21)$$

$$Ae^{(i\alpha-\gamma)b} + Be^{(i\alpha+\gamma)b} = Ce^{i(-\alpha+\beta)a} + De^{i(-\alpha-\beta)a}, \quad (2.22)$$

$$(-i\alpha + \gamma)Ae^{(i\alpha-\gamma)b} + (-i\alpha - \gamma)Be^{(i\alpha+\gamma)b} = i(-\alpha + \beta)Ce^{i(-\alpha+\beta)a} + i(-\alpha - \beta)De^{i(-\alpha-\beta)a}. \quad (2.23)$$

Para que esse sistema admita solução não trivial, precisamos que:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ -i\alpha + \gamma & -i\alpha - \gamma & -i(-\alpha + \beta) & -i(-\alpha - \beta) \\ e^{(i\alpha-\gamma)b} & e^{(i\alpha+\gamma)b} & -e^{i(-\alpha+\beta)a} & -e^{i(-\alpha-\beta)a} \\ (-i\alpha + \gamma)e^{(i\alpha-\gamma)b} & (-i\alpha - \gamma)e^{(i\alpha+\gamma)b} & -i(-\alpha + \beta)e^{i(-\alpha+\beta)a} & -i(-\alpha - \beta)e^{i(-\alpha-\beta)a} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.24)$$

Visando uma análise mais clara da estrutura dos dados, escolhemos reorganizar as informações, de modo que trocamos as colunas 1 e 3, bem como as colunas 2 e 4, não afetando em nada o resultado de nosso determinante. Essa abordagem nos permite uma disposição dos dados mais propícia para a interpretação, sem que isso interfira nos cálculos

ou conclusões a serem extraídas a partir do determinante.

$$\begin{vmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 \\ -i(-\alpha + \beta) & -i(-\alpha - \beta) & -i\alpha + \gamma & -i\alpha - \gamma \\ -e^{i(-\alpha+\beta)a} & -e^{i(-\alpha-\beta)a} & e^{(i\alpha-\gamma)b} & e^{(i\alpha+\gamma)b} \\ -i(-\alpha + \beta)e^{i(-\alpha+\beta)a} & -i(-\alpha - \beta)e^{i(-\alpha-\beta)a} & (-i\alpha + \gamma)e^{(i\alpha-\gamma)b} & (-i\alpha - \gamma)e^{(i\alpha+\gamma)b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.25)$$

Certamente é mais atraente trabalharmos com expoentes positivos, sendo assim, vamos multiplicar as colunas 1 e 2 por -1 e em nada alteramos o resultado, logo:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ i(-\alpha + \beta) & i(-\alpha - \beta) & -i\alpha + \gamma & -i\alpha - \gamma \\ e^{i(-\alpha+\beta)a} & e^{i(-\alpha-\beta)a} & e^{(i\alpha-\gamma)b} & e^{(i\alpha+\gamma)b} \\ i(-\alpha + \beta)e^{i(-\alpha+\beta)a} & i(-\alpha - \beta)e^{i(-\alpha-\beta)a} & (-i\alpha + \gamma)e^{(i\alpha-\gamma)b} & (-i\alpha - \gamma)e^{(i\alpha+\gamma)b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.26)$$

Para resolvermos esse determinante, será utilizado o método desenvolvido por Ram Swaroop Meghwal [18] que, após reconhecer o desafio que os alunos enfrentam ao tentar resolvê-lo, destaca a necessidade de uma abordagem sistemática e atraente para sua resolução, visando desenvolver o interesse dos estudantes oferecendo uma solução completa e original para esse desafio. A partir de agora, a notação R será utilizada para linha e C para coluna. Observe que na segunda e quarta linha, $-i\alpha$ aparece em cada termo, portanto, podemos removê-lo. Em qualquer determinante, uma das operações elementares de linha (ou coluna) que não afetam o seu valor é adicionar ou subtrair uma linha (ou coluna) a outra linha (ou coluna, desde que a linha (ou coluna) adicionada seja multiplicada por uma constante adequada), assim, façamos

$$R_2 \rightarrow R_2 + i\alpha R_1; R_4 \rightarrow R_4 + i\alpha R_3. \quad (2.27)$$

Isso nos leva imediatamente a uma simplificação:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ i\beta & -i\beta & \gamma & -\gamma \\ e^{i(\beta-\alpha)a} & e^{-i(\beta+\alpha)a} & e^{-(\gamma-i\alpha)b} & e^{(\gamma+i\alpha)b} \\ i\beta e^{i(\beta-\alpha)a} & -i\beta e^{-i(\beta+\alpha)a} & \gamma e^{-(\gamma-i\alpha)b} & -\gamma e^{(\gamma+i\alpha)b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.28)$$

Agora perceba que temos $-i\alpha$ apenas nos expoentes. Será ótimo fundi-lo com o período espacial do potencial. Como o valor do determinante é 0, qualquer linha ou coluna podem ser multiplicado por números finitos não nulo. Explorando esse fato, aplicaremos

$$R_3 \rightarrow e^{-i\alpha b} R_3; R_4 \rightarrow e^{-i\alpha b} R_4. \quad (2.29)$$

Ainda assim, por questões de brevidade podemos introduzir o parametro abaixo:

$$\varpi = e^{i\alpha(a+b)}, \varpi^* = e^{-i\alpha(a+b)}; \varpi\varpi^* = 1. \quad (2.30)$$

Esta consideração deixa nosso determinante acima da seguinte forma

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ i\beta & -i\beta & \gamma & -\gamma \\ \varpi^* e^{i\beta a} & \varpi^* e^{-i\beta a} & e^{-\gamma b} & e^{\gamma b} \\ i\beta\varpi^* e^{i\beta a} & -i\beta\varpi^* e^{-i\beta a} & \gamma e^{-\gamma b} & -\gamma e^{\gamma b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.31)$$

Agora, perceba que as duas últimas colunas aparentam ser mais simples que as duas primeiras, nesse sentido, vamos remover ϖ^* nas duas últimas linhas das duas primeiras colunas:

$$C_1 \rightarrow \varpi C_1; C_2 \rightarrow \varpi C_2, \quad (2.32)$$

logo,

$$\begin{vmatrix} \varpi & \varpi & 1 & 1 \\ i\beta\varpi & -i\beta\varpi & \gamma & -\gamma \\ e^{i\beta a} & e^{-i\beta a} & e^{-\gamma b} & e^{\gamma b} \\ i\beta e^{i\beta a} & -i\beta e^{-i\beta a} & \gamma e^{-\gamma b} & -\gamma e^{\gamma b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.33)$$

Antes de mais cálculos, substituimos

$$\beta a = v \quad (2.34)$$

e

$$\gamma b = w \quad (2.35)$$

assim,

$$\begin{vmatrix} \varpi & \varpi & 1 & 1 \\ i\beta\varpi & -i\beta\varpi & \gamma & -\gamma \\ e^{iv} & e^{-iv} & e^{-w} & e^w \\ i\beta e^{iv} & -i\beta e^{-iv} & \gamma e^{-w} & -\gamma e^w \end{vmatrix} = 0. \quad (2.36)$$

O determinante será facilmente tratável se seus elementos se tornarem 0 de alguma forma, nessa perspectiva,

$$C_2 \rightarrow \frac{(C_2 + C_1)}{2}, C_3 \rightarrow \frac{(C_3 + C_4)}{2}. \quad (2.37)$$

Desta forma, os expoentes negativos serão removidos e 0 serão criados:

$$\begin{vmatrix} \varpi & \varpi & 1 & 1 \\ i\beta\varpi & 0 & 0 & -\gamma \\ e^{iv} & \cos v & \cosh w & e^w \\ i\beta e^{iv} & -\beta \sin v & -\gamma \sinh w & -\gamma e^w \end{vmatrix} = 0. \quad (2.38)$$

Agora vamos tratar os expoentes positivos:

$$C_1 \rightarrow C_1 - C_2; C_4 \rightarrow C_4 - C_3, \quad (2.39)$$

assim,

$$\begin{vmatrix} 0 & \varpi & 1 & 0 \\ i\beta\varpi & 0 & 0 & -\gamma \\ i \sin v & \cos v & \cosh w & \sinh w \\ i\beta \cos v & -\beta \sin v & -\gamma \sinh w & -\gamma \cosh w \end{vmatrix} = 0. \quad (2.40)$$

Podemos perceber que na primeira coluna todos elementos multiplicam i , com intuito de removê-lo, com isso fazemos

$$C_1 \rightarrow \frac{C_1}{i}, \quad (2.41)$$

com isso,

$$\begin{vmatrix} 0 & \varpi & 1 & 0 \\ \beta\varpi & 0 & 0 & -\gamma \\ \sin v & \cos v & \cosh w & \sinh w \\ \beta \cos v & -\beta \sin v & -\gamma \sinh w & -\gamma \cosh w \end{vmatrix} = 0. \quad (2.42)$$

Podemos notar também que na última linha a maior parte dos elementos possuem sinal negativo, sendo assim, vamos deixá-los positivos a fim de simplificar a expressão:

$$R_4 \rightarrow R_4(-1), \quad (2.43)$$

nessa lógica,

$$\begin{vmatrix} 0 & \varpi & 1 & 0 \\ \beta\varpi & 0 & 0 & -\gamma \\ \sin v & \cos v & \cosh w & \sinh w \\ -\beta \cos v & \beta \sin v & \gamma \sinh w & \gamma \cosh w \end{vmatrix} = 0. \quad (2.44)$$

Se nos atentarmos, mais zeros podem ser criados com as duas colunas do meio e as duas

colunas externas, nesse ponto de vista,

$$C_2 \rightarrow C_2 - \varpi C_3; C_4 \rightarrow C_4 + \frac{\gamma}{\beta} \varpi^* C_1, \quad (2.45)$$

logo,

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ \beta \varpi & 0 & 0 & 0 \\ \sin v & \cos v - \varpi \cosh w & \cosh w & \sinh w + \frac{\gamma}{\beta} \varpi^* \sin v \\ -\beta \cos v & \beta \sin v - \varpi \gamma \sinh w & \gamma \sinh w & \gamma \cosh w - \gamma \varpi^* \cos v \end{vmatrix} = 0. \quad (2.46)$$

Agora vamos resolver o $\det 4 \times 4$ pela regra de Chió [19], nesse sentido, podemos escolher um elemento igual a 1, no caso a_{13} , e eliminar a linha e a coluna em que ele está, para em seguida montar um $\det 3 \times 3$ subtraindo cada elemento pelo produto das margens, das quais eliminamos. Nessa lógica, nosso novo determinante assume a seguinte forma

$$\begin{vmatrix} \beta \varpi & 0 & 0 \\ \sin v & \cos v - \varpi \cosh w & \sinh w + \frac{\gamma}{\beta} \varpi^* \sin v \\ -\beta \cos v & \beta \sin v - \varpi \gamma \sinh w & \gamma \cosh w - \gamma \varpi^* \cos v \end{vmatrix} = 0. \quad (2.47)$$

Para resolver o novo determinate, vamos utilizar a regra de Sarrus:

$$\begin{aligned} \beta \varpi (\cos v - \varpi \cosh w) (\gamma \cosh w - \gamma \varpi^* \cos v) - \beta \varpi \left(\sinh w + \frac{\gamma}{\beta} \varpi^* \sin v \right) \\ (\beta \sin v - \varpi \gamma \sinh w) = 0, \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \beta \varpi [(\gamma \cos v \cosh w - \gamma \varpi^* \cos^2 v - \gamma \varpi \cosh^2 w + \gamma \cos v \cosh w) - (\beta \sin v \sinh w \\ - \gamma \varpi \sinh^2 w + \gamma \varpi^* \sin^2 v - \frac{\gamma^2}{\beta} \varpi \sin v \sinh w)] = 0, \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \beta \varpi [(2\gamma \cos v \cosh w - \gamma \varpi^* (\cos^2 v + \sin^2 v) - \gamma \varpi (\cosh^2 w - \sinh^2 w) \\ - \beta \sin v \sinh w + \frac{\gamma^2}{\beta} \varpi \sin v \sinh w)] = 0, \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\beta \varpi \left[(2\gamma \cos v \cosh w - \gamma (\varpi^* + \varpi) + \sin v \sinh w \left(-\beta + \frac{\gamma^2}{\beta} \right)) \right] = 0, \quad (2.51)$$

dividindo os dois lados da equação por 2 e reorganizando:

$$\beta \varpi \gamma \cos v \cosh w - \beta \varpi \gamma \left(\frac{\varpi^* + \varpi}{2} \right) + \varpi \sin v \sinh w \left(\frac{-\beta^2 + \gamma^2}{2} \right) = 0, \quad (2.52)$$

agora, dividindo os dois lados da equação por $\beta\varpi\gamma$:

$$\cos v \cosh w - \left(\frac{\varpi^* + \varpi}{2} \right) + \sin v \sinh w \left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \right) = 0, \quad (2.53)$$

substituindo as Eqs. (2.30), (2.34) e (2.35) na Eq. acima, obtemos

$$\cos\beta a \cosh \gamma b - \left(\frac{e^{-i\alpha(a+b)} + e^{i\alpha(a+b)}}{2} \right) + \sin \beta a \sinh \gamma b \left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \right) = 0. \quad (2.54)$$

Se observarmos bem, podemos utilizar a fórmula de Euler que relaciona a exponencial complexa com as funções cosseno e seno, assim:

$$\cos\beta a \cosh \gamma b - \cos \alpha(a+b) + \sin \beta a \sinh \gamma b \left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \right) = 0, \quad (2.55)$$

passando tudo que não depende de β para o lado esquerdo da equação e reorganizando-a, obtemos

$$\left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \right) \sin \beta a \sinh \gamma b + \cos\beta a \cosh \gamma b = \cos \alpha(a+b). \quad (2.56)$$

Substituindo as Eqs. (2.8) e (2.9) em (2.56) e lembrando que $a+b=d$:

$$\left(\frac{(\kappa\sqrt{V_0-E})^2 - (\kappa\sqrt{E})^2}{2(\kappa\sqrt{E})(\kappa\sqrt{V_0-E})} \right) \sin \beta a \sinh \gamma b + \cos\beta a \cosh \gamma b = \cos \alpha d. \quad (2.57)$$

$$\left(\frac{V_0 - 2E}{2\sqrt{E(V_0-E)}} \right) \sin \beta a \sinh \gamma b + \cos\beta a \cosh \gamma b = \cos \alpha d. \quad (2.58)$$

Note que a equação 2.58 é para $V_0 > E$, se considerarmos $V_0 < E$ precisamos modificar a Eq. (2.9), assim, vamos fazer $\theta = i\gamma$, logo:

$$\theta = i\gamma = \kappa\sqrt{E - V_0}. \quad (2.59)$$

Jogando o i para o lado esquerdo da equação, ficaremos com $\gamma = \frac{\theta}{i}$ ou $\gamma = -i\theta$. Substituindo essas ultima expressão na Eq. (2.56):

$$\left[\frac{(-i\theta)^2 - \beta^2}{2\beta(-i\theta)} \right] \sin \beta a \sinh [(-i\theta)b] + \cos\beta a \cosh [(-i\theta)b] = \cos \alpha d. \quad (2.60)$$

No entanto, a função $\sinh$ é ímpar e $\cosh$ é par, logo $\sinh -i\theta b = -\sinh i\theta b$ e $\cosh -i\theta b = \cosh i\theta b$, logo nossa Eq. (2.60) assume a seguinte forma:

$$\left[\frac{i^2\theta^2 - \beta^2}{2i\beta\theta} \right] \sin \beta a \sinh i\theta b + \cos\beta a \cosh i\theta b = \cos \alpha d. \quad (2.61)$$

Mas $\sinh i\theta b = i \sin \theta b$ e $\cosh i\theta b = \cos \theta b$. Assim, nossa Eq. 2.61 é expressa como:

$$\left[\frac{i^2 \theta^2 - \beta^2}{2i\beta\theta} \right] i \sin \beta a \sin \theta b + \cos \beta a \cos \theta b = \cos \alpha d. \quad (2.62)$$

Substituindo as Eqs. (2.8) e (2.59) em (2.62) e reorganizando-a, vamos encontrar a expressão desejada para $V_0 < E$:

$$\left(\frac{V_0 - 2E}{2\sqrt{E(E - V_0)}} \right) \sin \beta a \sin \theta b + \cos \beta a \cos \theta b = \cos \alpha d. \quad (2.63)$$

Trabalhando agora com a Eq. (2.56), consideramos uma barreira extremamente alta, com $V \rightarrow \infty$, e ao mesmo tempo, sua largura é muito estreita, com $b \rightarrow 0$, de modo que o produto $\gamma^2 b$ permaneça finito. Nessa perspectiva, surge uma configuração de uma série de poços separados por uma sequência de barreiras infinitas. Para lidar com essa situação, empregamos séries de Taylor para realizar aproximações das funções hiperbólicas $\sinh$ e $\cosh$, assumindo que γb é pequeno. Dessa forma, aproximamos $\sinh(\gamma b)$ por (γb) ao truncar a série após o termo linear, e $\cosh(\gamma b)$ por 1 ao truncar a série após o termo constante, assim:

$$\left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta\gamma} \right) \gamma b \sin \beta a + \cos \beta a = \cos \alpha a, \quad (2.64)$$

$$\frac{a}{a} \left(\frac{\gamma^2 - \beta^2}{2\beta} \right) b \sin \beta a + \cos \beta a = \cos \alpha a, \quad (2.65)$$

$$\left(\frac{\gamma^2 b a}{2} \right) \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos \alpha a, \quad (2.66)$$

fazendo

$$\lim_{\left(\substack{b \rightarrow 0 \\ \gamma \rightarrow \infty} \right)} \frac{\gamma^2 b a}{2} = P, \quad (2.67)$$

vamos obter,

$$P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos \alpha a. \quad (2.68)$$

Para abordar a análise das raízes das Eqs. (2.58) e (2.68) foi gerado um gráfico do lado esquerdo de cada equação, representadas por $f(E)$, em função da energia, onde obtemos uma curva em preto para a primeira, considerando uma sequência de barreiras de larguras 2,5nm e alturas de 100meV, separadas por poços de 10nm de largura. Já para a segunda, encontramos a curva tracejada vermelha onde conforme especificado no artigo de referência [1], adotamos o valor P igual a $\frac{3\pi}{2}$.

Podemos observar que os valores de βa que satisfazem a Eq. (2.68) estão entre o intervalo de -1 a 1 regido por $\cos(\alpha a)$. Nem todas as energias são admissíveis, e isso

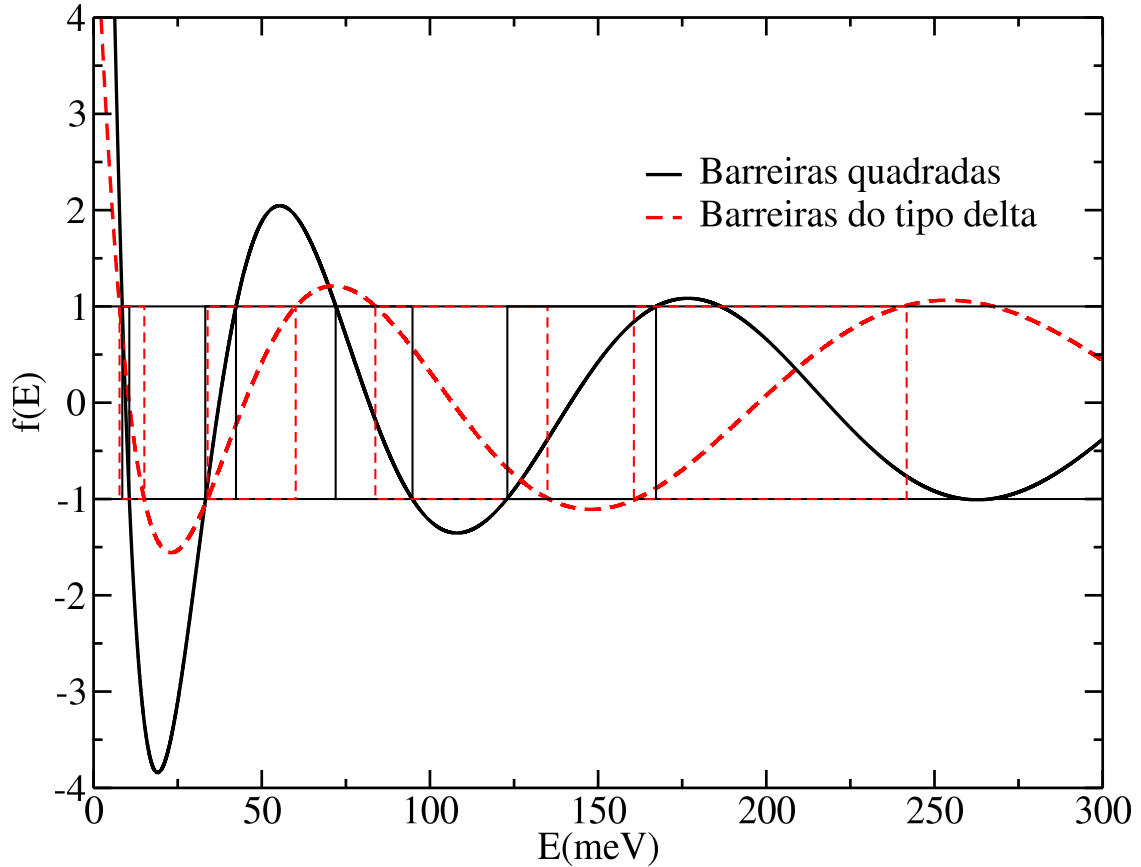


Figura 4: Diagrama de bandas do modelo de Kronig-Penney, onde a curva preta é plotada a partir do lado esquerdo da Eq. (2.58) e a curva vermelha tracejada a partir do lado esquerdo da Eq. (2.68). Essas equações do lado citado são representadas por $f(E)$ e a primeira curva, é referente a uma sequência de barreiras de larguras 2, 5nm separadas por poços de 10nm de largura. A altura das barreiras é 100meV. A curva tracejada vermelha é para o caso de barreiras do tipo função delta de Dirac para $P = 3\pi/2$. As bandas de energia também estão especificadas, onde as retas pretas verticais que intersectam as duas retas pretas horizontais indicam as bandas de energia para a curva preta e retas vermelhas tracejadas verticais que intersectam essas duas retas ilustram as bandas para a segunda curva.

decorre do fato do lado esquerdo da Eq. (2.68) poder assumir valores fora do intervalo de $-1 < x < 1$, que corresponde a valores de k imaginários, indicando ondas enfraquecidas. Em termos mais simples, o espectro de energia dos eletrons consiste em faixas de energias permitidas, valores de βa que satisfazem a (2.68), e proibidas, que não satisfazem.

No caso limite em que $P \rightarrow \infty$ a região permitida se torna infinitamente estreita e assim essas poções permitidas do eixo βa são reduzidas aos pontos $n\pi$ ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$):

$$\beta a = n\pi. \quad (2.69)$$

Por consequência, o espectro de energia agora se torna discreto

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.70)$$

Os valores de energia são de um elétron confinado a se mover entre duas barreiras de potencial impenetráveis a uma distância a . Este é o resultado que obtemos para uma partícula em uma caixa de dimensões atômicas com um potencial constante, ou seja, elétrons fortemente ligados onde o tunelamento através das barreiras torna-se improvável. Isso mostra o caso de um isolante.

Já para o caso de $P \rightarrow 0$,

$$\cos \beta a = \cos \alpha a, \quad (2.71)$$

logo,

$$\beta = \alpha. \quad (2.72)$$

Isso representa a energia de um elétron completamente livre para o qual qualquer valor de energia é possível, mostrando o caso de um condutor.

2.1.1 Modelo de Kronig-Penney considerando um potencial Delta de Dirac

Uma forma de chegar na equação transcendental bem mais rápido, sem que seja necessário se deparar com o determinante 4×4 e preservando as discussões sobre as bandas de energia é considerar uma longa série de pontinhos estreitos $b \rightarrow 0$, bastante altos $V_0 \rightarrow \infty$ e uniformemente espaçados, com distância a , de função delta, ao invés de trabalharmos com barreiras de potencial, no caso, uma rede de Dirac unidimensional, Fig. 5. Métodos similares podem ser encontrados em [15], que exprime ser o modelo mais simples possível, e [8], que o chama de caso especial do formalismo convencional do modelo de Kronig-Penney. Com isso, vamos considerar um elétron submetido a este potencial $V(x)$, confinante e periódico, no caso:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_0 \delta(x - na), \quad (2.73)$$

em que U_0 é um parâmetro que nos diz a intensidade do potencial, onde se for negativo, teremos potenciais atrativos muito intensos e de curto alcance e se positivo, serão barreiras de potencial, estreitas e elevadas.

Como estamos trabalhando com um potencial periódico, vamos resolver 2.1 para as regiões I, de $-a < x < 0$, e II, de $0 < x < a$, que são mostradas na Fig. 5, onde $V = 0$, e posteriormente vamos transladar o nosso potencial com o intuito de generalizar

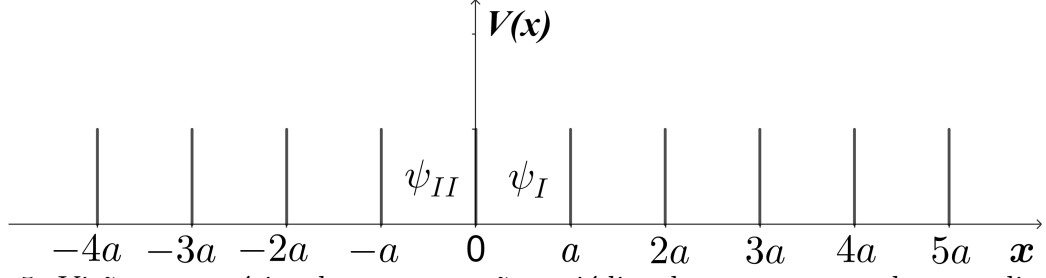


Figura 5: Visão esquemática de uma sucessão periódica de pontos espaçados com distâncias múltiplas de a , conhecido como rede de Dirac unidimensional, contendo a função de onda ψ_I da região I , intervalo de $0 < x < a$, e ψ_{II} da região II , intervalo de $-a < x < 0$. Fonte: Próprio autor.

em todo o dominio das posições x . As funções de onda em cada região toma a forma de:

$$\psi_I(x) = Ae^{iQx} + Be^{-iQx} \quad (2.74)$$

e

$$\psi_{II}(x) = Ce^{iQx} + De^{-iQx}, \quad (2.75)$$

em que

$$E = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}, \quad (2.76)$$

onde Q é o parâmetro reduzido da energia.

Temos então que a partícula viaja nas duas regiões e quando se choca com a barreira de potencial delta de Dirac espalha podendo ser transmitida ou refletida. O teorema de Bloch nos diz que para um potencial periódico, as soluções para a Eq. (2.1) podem ser selecionadas a fim de atender à condição

$$\psi(x) = e^{ika}\psi(x-a). \quad (2.77)$$

Em sequência, vamos relacionar a região I, Eq. (2.74), com o lado direito da Eq. (2.77) e a região II, Eq. (2.75), com o lado esquerdo dela:

$$Ce^{iQx} + De^{-iQx} = e^{ika}(Ae^{iQ(x-a)} + Be^{-iQ(x-a)}), \quad (2.78)$$

passando tudo para o lado esquerdo da equação e organizando a expressão, encontramos

$$(C - e^{ika}Ae^{-iQa})e^{iQx} + (D - e^{ika}Be^{iQa})e^{-iQx} = 0. \quad (2.79)$$

Para a igualdade ser válida, os coeficientes dos termos $e^{\pm iQx}$ precisam ser nulos,

$$C = Ae^{i(k-Q)a} \quad (2.80)$$

e

$$D = Be^{i(k+Q)a}. \quad (2.81)$$

Pode se observar que A, B, C e D são analógicos e deve ser oferecido uma fase para transitar de A para C e de B para D, e vice e versa.

Agora vamos determinar a energia, no caso, o parâmetro Q , com isso, vamos de início avaliar a continuidade de $\psi(x)$ em $x = 0$.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad (2.82)$$

logo,

$$A + B = C + D, \quad (2.83)$$

substituindo os valores as Eqs. (2.80) e (2.81) e deixando tudo do lado esquerdo da equação e posteriormente colocando A e B em evidencia, obtemos:

$$[1 - e^{i(k-Q)a}]A + [1 - e^{i(k+Q)a}]B = 0. \quad (2.84)$$

Vejamos a outra relação entre A e B. Temos que a primeira derivada das duas regiões também deve ser continua em $x=0$. Avaliando o que ocorre com a Eq. (2.1) em $x = 0$ (Ponto em que temos a descontinuidade devido a U_0), encontramos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_{II} - \psi'_I) + U_0\psi_0 = 0, \quad (2.85)$$

onde pela translação de simetria, conseguimos saber o que acontece em todos os outros pontos delta de Dirac. As derivadas das funções de ondas nas regiões I e II assumindo $x = 0$, são dadas por:

$$\psi'_{II}(0) = iQ(C - D) = iQ(Ae^{-iQa} - Be^{iQa})e^{ika}, \quad (2.86)$$

e

$$\psi'_I(0) = iQ(A - B). \quad (2.87)$$

Chamando:

$$u_0 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}, \quad (2.88)$$

a Eq. (2.85) toma a seguinte forma:

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = u_0\psi(0), \quad (2.89)$$

substituindo as Eq's (2.87) e (2.86) em (2.89), obtemos:

$$iQA(e^{i(k-Q)a} - 1) + iQB(-e^{i(k+Q)a} + 1) = u_0(A + B), \quad (2.90)$$

dividindo ambos os lados por iQ e passando tudo para o lado esquerdo da equação, obtemos a segunda relação entre os coeficientes A e B:

$$A \left(e^{i(k-Q)a} - 1 - \frac{u_0}{iQ} \right) + B \left(-e^{i(k+Q)a} + 1 - \frac{u_0}{iQ} \right) = 0. \quad (2.91)$$

As Eq's (2.84) e (2.91) formam um sistema linear homogêneo capaz de determinar A e B e para que ele admita soluções não-triviais, precisamos que:

$$\begin{vmatrix} 1 - e^{i(k-Q)a} & 1 - e^{i(k+Q)a} \\ e^{i(k-Q)a} - 1 - \frac{u_0}{iQ} & -e^{i(k+Q)a} + 1 - \frac{u_0}{iQ} \end{vmatrix} = 0, \quad (2.92)$$

resolvendo o determinante:

$$(1 - e^{i(k-Q)a}) \left(-e^{i(k+Q)a} + 1 - \frac{u_0}{iQ} \right) - (1 - e^{i(k+Q)a}) \left(e^{i(k-Q)a} - 1 - \frac{u_0}{iQ} \right) = 0, \quad (2.93)$$

manipulando a equação, chegamos em:

$$\cos ka = \cos Qa + \frac{u_0 a \sin Qa}{2 Qa}, \quad (2.94)$$

se $u_0 = 0 \Rightarrow k = Q$, que cairia em uma solução trivial. Ainda assim, o potencial adiciona o fator extra em nossa equação, no caso, ele introduz a relação entre a fase que ocorre durante uma translação e a energia associada a Q . Vamos considerar

$$f(k) = \cos ka, \quad (2.95)$$

e

$$g(Q) = \cos Qa + \frac{u_0 a \sin Qa}{2 Qa}, \quad (2.96)$$

fazendo

$$\frac{u_0 a}{2} = T, \quad (2.97)$$

nossa Eq. (2.96) toma a seguinte forma

$$g(Q) = \cos Qa + T \frac{\sin Qa}{Qa}. \quad (2.98)$$

Temos que a Eq. (2.95) pertence ao intervalo de -1 a 1 para qualquer k e o comportamento da curva da Eq. (2.98) se considerarmos $T = \frac{3\pi}{2}$, assim como fizemos com P na Eq. (2.68), é o mesmo da curva vermelha tracejada da Figura 4. Assim, chegamos nas mesmas

conclusões que o formalismo convencional, no entanto, de uma maneira mais simples e rápida.

3 DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO DO FORMALISMO ALTERNATIVO PARA O MODELO KRONIG-PENNEY

Nessa seção iremos revisitar um formalismo alternativo para o modelo de Kronig-Penney a partir do artigo de Cho e Prucnal [2]. Ele é destacado por ser mais simples e direto do que o convencional, permitindo não apenas a determinação das bandas de energia dos portadores, mas também das funções de onda de envelope nas bordas de cada banda. Em seguida, vamos discutir as diferenças entre os formalismos e faremos o diagrama de bandas baseado nas equações encontradas. Vale ressaltar que este estudo comparativo apresentado não se encontra nos livros-texto tradicionais, destacando sua relevância no ensino de física, em específico, na ampliação da compreensão do modelo de Kronig-Penney.

3.1 formalismo alternativo do modelo de Kronig-Penney

Da Eq. (2.58) e (2.63) façamos $\alpha d = \phi$, assim:

$$\left(\frac{V_0 - 2E}{2\sqrt{E(V_0 - E)}} \right) \sin \beta a \sinh \gamma b + \cos \beta a \cosh \gamma b = \cos \phi. \quad (3.1)$$

e

$$\left(\frac{V_0 - 2E}{2\sqrt{E(E - V_0)}} \right) \sin \beta a \sin \theta b + \cos \beta a \cos \theta b = \cos \phi. \quad (3.2)$$

em que ϕ é a diferença de fase da função de onda após uma translação espacial de $d = a + b$.

Para um período de $-b < x < a$ as soluções propostas para $V > E$ são as seguintes:

$$\psi_a(x) = Ae^{i\beta(x-\frac{a}{2})} + Be^{-i\beta(x-\frac{a}{2})}, \quad (3.3)$$

no intervalo $0 < x < a$ e

$$\psi_b(x) = Ce^{\gamma(x+\frac{b}{2})} + De^{-\gamma(x+\frac{b}{2})}, \quad (3.4)$$

no intervalo $-b < x < 0$, onde A , B , C e D são números complexos. Já para um período adjacente, de $a < x < d + a$, as soluções são dadas por:

$$\psi_c(x) = e^{i\phi} [Ae^{i\beta(x-\frac{a}{2}-d)} + Be^{-i\beta(x-\frac{a}{2}-d)}], \quad (3.5)$$

para o intervalo de $d < x < d + a$ e

$$\psi_d(x) = e^{i\phi} [Ce^{\gamma(x+\frac{b}{2}-d)} + De^{-\gamma(x+\frac{b}{2}-d)}], \quad (3.6)$$

para o intervalo de $a < x < d$, em que $e^{i\phi}$ é o fator de fase. Considerando os mesmos períodos, temos que para $V < E$, as soluções propostas se repetem para ψ_a e ψ_c , no

entanto, elas precisam ser alteradas para ψ_b e ψ_d . Da Eq. (2.59), façamos $\gamma = -i\theta$, similar ao que fizemos na seção 2, assim, nossas Eqs. (3.4) e (3.6) tomam a seguinte forma:

$$\psi_b(x) = Ce^{-i\theta(x+\frac{b}{2})} + De^{i\theta(x+\frac{b}{2})}, \quad (3.7)$$

e

$$\psi_d(x) = e^{i\phi}[Ce^{-i\theta(x+\frac{b}{2}-d)} + De^{i\theta(x+\frac{b}{2}-d)}], \quad (3.8)$$

Podemos visualizar as funções (3.3), (3.4) ou (3.7), (3.5) e (3.6) ou (3.8), nos poços e nas barreiras na Figura 6. Ainda assim, do teorema de Bloch:

$$\psi(x+d) = e^{i\phi}\psi(x), \quad (3.9)$$

onde $\psi(x)$ é função de onda associada a uma partícula em uma posição x e $\psi(x+d)$ é a função de onda associada à mesma partícula, mas agora deslocada por uma distância d em relação à posição original. Vizualizando de outra forma, a epressão (3.9) fica:

$$\psi(x) = e^{i\phi}\psi(x-d), \quad (3.10)$$

e assim, podemos notar que $\psi_c(x) = e^{i\phi}\psi_a(x-d)$ e $\psi_d(x) = e^{i\phi}\psi_b(x-d)$.

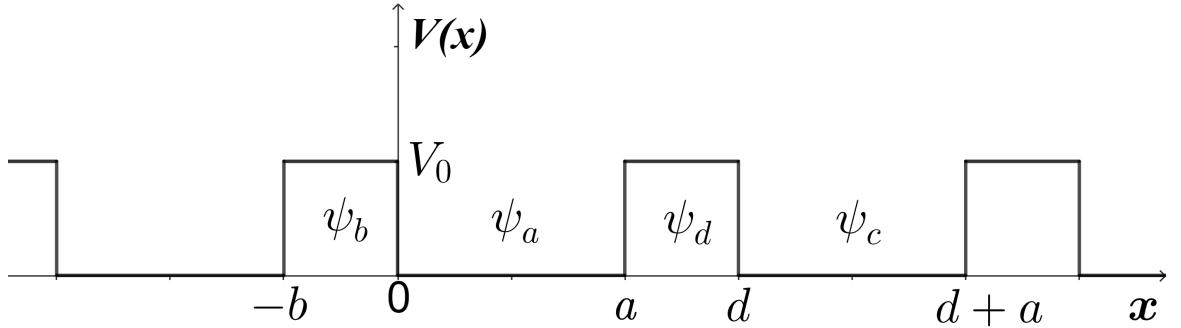


Figura 6: Visão esquemática de uma sucessão periódica de poços quadrados finitos similar a Figura 3, no entanto, mostrando as funções de ondas presentes nos poços, ψ_a e ψ_c , e barreiras, ψ_b e ψ_d . Fonte: Próprio autor.

Observando o lado direito das Eqs. (3.1) e (3.2), nota-se, como já realizada uma discussão parecida na seção 2, que $\cos \phi$ varia de -1 a 1 e observando a Fig. 7 esses valores correspondem aos extremos das bandas de energia permitidas. Com isso, entre $\psi(x)$ e $\psi(x+d)$ a diferença de fase ϕ pode ser 0 ($\cos \phi = 1$) ou $\pm\pi$ ($\cos \phi = -1$) para ψ correspondente a energia mínima e máxima de cada banda, ou seja, funções de onda associadas a esses extremos das bandas. A diferença de fase ϕ entre $\psi_a(0)$ e $\psi_c(d)$ é dado por:

$$\phi = \phi_b + \phi_a, \quad (3.11)$$

onde ϕ_b é a diferença de fase entre $\psi_a(a)$ e $\psi_d(d)$ e ϕ_a entre $\psi_a(0)$ e $\psi_a(a)$.

Como para os extremos das bandas ϕ deve assumir o valor de 0 ou $\pm\pi$, então ϕ_a e ϕ_b também deve assumir esses valores, de forma que a igualdade da Eq. (3.11) seja respeitada. Assim, na expressão (3.3), caso A seja diferente de B ou $-B$, ϕ_a assume valores diferentes de 0 ou $\pm\pi$. Similarmente, para a condição em que C é diferente de D ou $-D$ na Eq. (3.4) ou (3.7), ϕ_b também se diferencia de 0 ou $\pm\pi$. Em uma perspectiva mais abrangente, quando ϕ_a e ϕ_b não compartilham paridade par ou ímpar, indicando que $A \neq B$ ou $-B$, ou $C \neq D$ ou $-D$, a diferença de fase total não pode ser nula ou $\pm\pi$. Este cenário implica que essas funções de onda de envelope, correspondentes aos valores mínimo e máximo de energia de cada banda, devem exibir paridade par ou ímpar.

Prova: Se $A = B$, nossa Eq. (3.3) toma a seguinte forma:

$$\psi_a(x) = A[e^{i\beta(x-\frac{a}{2})} + e^{i\beta(x-\frac{a}{2})}]. \quad (3.12)$$

Aplicando a formula de Euler para o cosseno,

$$e^{i\vartheta} + e^{-i\vartheta} = 2 \cos \vartheta, \quad (3.13)$$

obtemos,

$$\psi_a(x) = A \cos \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right]. \quad (3.14)$$

Já quando $A = -B$,

$$\psi_a(x) = A[e^{i\beta(x-\frac{a}{2})} - e^{i\beta(x-\frac{a}{2})}]. \quad (3.15)$$

Assim, da formula de Euler para o seno,

$$e^{i\vartheta} - e^{-i\vartheta} = 2i \sin \vartheta, \quad (3.16)$$

substituindo em nossa expressão (3.15):

$$\psi_a(x) = A \sin \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right]. \quad (3.17)$$

Agora para $C = D$, a nossa Eq. (3.4) se transforma em:

$$\psi_b(x) = C[e^{\gamma(x+\frac{b}{2})} + e^{-\gamma(x+\frac{b}{2})}], \quad (3.18)$$

recorrendo a expressão da função cosseno hiperbólico,

$$e^{\vartheta} + e^{-\vartheta} = 2 \cosh \vartheta, \quad (3.19)$$

encontramos:

$$\psi_b(x) = C \cosh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.20)$$

Por ultimo, para $C = -D$

$$\psi_b(x) = C[e^{\gamma(x+\frac{b}{2})} - e^{-\gamma(x+\frac{b}{2})}]. \quad (3.21)$$

Lembrando da expressão da função seno hiperbólico:

$$e^{\vartheta} - e^{-\vartheta} = 2 \sinh \vartheta, \quad (3.22)$$

substituindo na Eq. (3.22), obtemos:

$$\psi_b(x) = C \sinh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.23)$$

Ainda assim, note que as funções acima estão relacionadas a $V > E$, estritamente as Eqs. (3.20) e (3.23), assim, vamos modifica-las para $V < E$. Se $C = D$, nossa Eq. (3.7) toma a seguinte forma:

$$\psi_b(x) = C[e^{i\theta(x+\frac{b}{2})} + e^{-i\theta(x+\frac{b}{2})}], \quad (3.24)$$

aplicando a formula de Euler para o cosseno, obtemos:

$$\psi_b(x) = C \cos \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.25)$$

Já quando $C=-D$

$$\psi_b(x) = C[e^{i\theta(x+\frac{b}{2})} - e^{-i\theta(x+\frac{b}{2})}], \quad (3.26)$$

utilizando da formula de Euler para o seno, chegamos na seguinte expressão:

$$\psi_b(x) = C \sin \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.27)$$

Logo, ao se considerar $A = B$ ou $-B$ e $C = D$ ou $-D$ obtemos funções pares, Eqs. (3.14), (3.20) e (3.25), e ímpares, Eqs. (3.17), (3.23) e (3.27). Com isso, vamos agora trabalhar com as paridades das funções de onda de envelope para encontrar as energias mínimas e máximas das bandas, separando a discussão em bandas de índice ímpar e índice par. Essa separação vai de uma análise da Fig. 4, onde para todas as faixas de índice ímpar, a curva mostrada pela Eq. (3.1) começa de cima para baixo, onde a energia mínima E_{min} corresponde a $\phi = 0$ e máxima E_{max} a $\phi = \pm\pi$, sendo o inverso para as bandas de índice par.

3.1.1 Bandas de índice ímpar (n=1,3,5,...)

A E_{min} para n ímpar corresponde a $\phi = 0$ pois $\cos\phi = 1$, assim ϕ_a e ϕ_b devem ser ambos pares ou ímpares, já que a diferença de fase é nula. Para qualquer valor de b ,

ψ_a^{min} e ψ_a^{max} devem ter a mesma paridade, pois para a largura da barreira muito grande, as bandas se tornam tão estreitas que as energias permitidas ficam muito próximas umas das outras, quase se transformando em um único nível de energia. Assim, podemos dizer que a largura de banda desaparece e estas funções tornam-se iguais. Além disso, ψ_a é par para o primeiro estado (fundamental), ímpar para o segundo e alternando entre par e ímpar com n crescente. Dada essas considerações, ψ_a^{min} e ψ_b^{min} de cada banda de índice ímpar tem paridade par, logo, das Eqs. (3.14) e (3.20) temos:

$$\psi_a^{min} = A \cos \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right]. \quad (3.28)$$

e

$$\psi_b^{min} = C \cosh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.29)$$

respectivamente. Utilizando as seguintes condições de contorno:

$$[\psi_a]_{x=0} = [\psi_b]_{x=0}, \quad (3.30)$$

$$\left[\frac{d\psi_a}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{d\psi_b}{dx} \right]_{x=0}, \quad (3.31)$$

obtemos respectivamente:

$$A \cos \left(\beta \frac{a}{2} \right) = C \cosh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) \quad (3.32)$$

e

$$A \beta \sin \left(\beta \frac{a}{2} \right) = C \gamma \sinh \left(\gamma \frac{b}{2} \right), \quad (3.33)$$

Para que esse sistema admita solução não trivial, precisamos que:

$$\begin{vmatrix} \cos(\beta \frac{a}{2}) & -\cosh(\gamma \frac{b}{2}) \\ \beta \sin(\beta \frac{a}{2}) & -\gamma \sinh(\gamma \frac{b}{2}) \end{vmatrix} = 0. \quad (3.34)$$

Resolvendo o determinante:

$$-\cos \left(\beta \frac{a}{2} \right) \gamma \sinh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) + \beta \sin \left(\beta \frac{a}{2} \right) \cosh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.35)$$

Dividindo os dois lados da equação por $\cosh(\gamma \frac{b}{2}) \cos(\beta \frac{a}{2})$:

$$-\gamma \tanh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) + \beta \tan \left(\beta \frac{a}{2} \right) = 0. \quad (3.36)$$

Agora dividindo ambos os lados da equação por β :

$$\tan \left(\beta \frac{a}{2} \right) - \frac{\gamma}{\beta} \tanh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) = 0, \quad (3.37)$$

obtemos a energia mínima de cada banda de índice ímpar considerando $V > E$. Agora, se considerarmos $V < E$, ψ_a^{min} e ψ_b^{min} de cada banda de índice ímpar continua tendo paridade par, ou melhor, as paridades não irão se alterar considerando $V < E$, como podemos ver nas equações obtidas na prova, assim, das Eqs. (3.14) e (3.25) temos:

$$\psi_a^{min} = A \cos \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right] \quad (3.38)$$

e

$$\psi_b^{min} = C \cos \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right], \quad (3.39)$$

respectivamente. Aplicando as condições de contorno, obtemos, na devida ordem:

$$A \cos \left(\beta \frac{a}{2} \right) = C \cos \left(\theta \frac{b}{2} \right) \quad (3.40)$$

e

$$A \beta \sin \left(\beta \frac{a}{2} \right) = -C \gamma \sin \left(\theta \frac{b}{2} \right), \quad (3.41)$$

onde novamente caímos em um determinante:

$$\begin{vmatrix} \cos(\beta \frac{a}{2}) & -\cos(\theta \frac{b}{2}) \\ \beta \sin(\beta \frac{a}{2}) & \theta \sin(\gamma \frac{b}{2}) \end{vmatrix} = 0. \quad (3.42)$$

Resolvendo essa equação, obtemos a enégia mínima de cada banda de índice ímpar mas, para $V < E$:

$$\tan \left(\beta \frac{a}{2} \right) + \frac{\theta}{\beta} \tan \left(\theta \frac{b}{2} \right) = 0, \quad (3.43)$$

A menor solução da Eq. (3.37) corresponde a $n = 1$, já a solução seguinte à $n = 3$, e assim por diante. No entanto, para saber o índice de banda correspondente à menor solução da Eq. (3.43), enfatizando que $V < E$, vai depender de quantas bandas estão confinadas dentro do poço, logo é importante saber o valor da altura da barreira de potencial.

Agora para encontrar E_{max} de cada banda de indice ímpar, observe que $\phi = \pm\pi$ pois $\cos \phi = -1$ e pelo que foi descrito anteriormente, $\phi_a = 0$ pois ψ_a^{max} é par, sendo assim $\phi_b = \pm\pi$, ou melhor, ϕ_b é ímpar, já que da Eq. (3.11), $\pm\pi = \phi_b + 0$, logo, das Eqs. (3.14) e (3.23):

$$\psi_a^{max} = A \cos \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.44)$$

e

$$\psi_b^{max} = C \sinh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.45)$$

respectivamente. Utilizando das condições de contorno, Eqs. (3.30) e (3.31), obtemos

respectivamente:

$$A \cos \left(\beta \frac{a}{2} \right) = C \sinh \left(\gamma \frac{b}{2} \right), \quad (3.46)$$

e

$$A\beta \sin \left(\beta \frac{a}{2} \right) = C\gamma \cosh \left(\gamma \frac{b}{2} \right), \quad (3.47)$$

Do mesmo procedimento seguido previamente, montando o determinante 2 x 2, resolvendo-o e simplificando o resultado encontrado, encontramos a energia máxima de cada banda de índice ímpar para $V > E$:

$$\tan \left(\beta \frac{a}{2} \right) - \frac{\gamma}{\beta} \coth \left(\gamma \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.48)$$

Para $V < E$, das Eqs. (3.14) e (3.27) obtemos, na devida ordem:

$$\psi_a^{max} = A \cos \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.49)$$

e

$$\psi_b^{max} = C \sin \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.50)$$

Repetindo o mesmo procedimento anterior, encontramos a energia máxima para as bandas de índice ímpar para $V < E$:

$$\tan \left(\beta \frac{a}{2} \right) - \frac{\theta}{\beta} \cot \left(\theta \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.51)$$

Para dar continuidade, veremos agora as bandas que possuem índice par.

3.1.2 Bandas de índice par (n=2, 4, 6,...)

A E_{min} para n par corresponde a $\phi = \pm\pi$ pois $\cos\phi = -1$, assim ϕ_a e ϕ_b possuem paridades diferentes e como visto anteriormente, ψ_a para índices pares é ímpar, consequentemente $\phi_b = 0$ já que $\phi_a = \pm\pi$, logo, ψ_b é par, assim, das Eqs (3.17) e (3.20):

$$\psi_a^{min} = A \sin \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.52)$$

$$\psi_b^{min} = C \cosh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.53)$$

Fazendo o mesmo que fizemos para as bandas de n ímpar, dado a aplicação das condições de contorno, em seguida trabalhando com o determinante 2 x 2 e simplificando logo depois, obtemos a energia mínima de cada banda de índice par para $V > E$:

$$\cot \left(\beta \frac{a}{2} \right) + \frac{\gamma}{\beta} \tanh \left(\gamma \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.54)$$

Agora para $V < E$, respectivamente, das Eqs (3.17) e (3.25), expressamos:

$$\psi_a^{min} = A \sin \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.55)$$

$$\psi_b^{min} = C \cos \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right]. \quad (3.56)$$

Executando o procedimento anterior novamente, identificamos a energia máxima para as bandas de índice ímpar quando $V < E$.

$$\cot \left(\beta \frac{a}{2} \right) - \frac{\theta}{\beta} \tan \left(\theta \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.57)$$

Obviamente, o mesmo argumento para as bandas de índices ímpares são validas aqui, onde nesse caso a menor solução da Eq. (3.54) corresponde a $n = 2$, já a solução seguinte é a $n = 4$, e assim por diante, e da mesma forma, para saber o índice de banda correspondente à menor solução da Eq. (3.57), irá depender de quantas bandas estão confinadas dentro do poço.

Agora para encontrar E_{max} de cada banda de indice par, observe que $\phi = 0$ pois $\cos \phi = 1$, assim ϕ_a e ϕ_b devem ter a mesma paridade, no entanto, sabemos que para energias máximas em índices pares ψ_a é ímpar, implicando $\phi_a = \pm\pi$ e consequentemente $\phi_b = \pm\pi$ também, já que $\phi_a + \phi_b = 0$, assim, das Eqs. (3.17) e (3.23):

$$\psi_a^{max} = A \sin \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.58)$$

e

$$\psi_b^{max} = C \sinh \left[\gamma \left(x + \frac{b}{2} \right) \right], \quad (3.59)$$

respectivamente. Seguindo a lógica do procedimento utilizado acima obtemos a energia máxima de cada banda de índice par para $V > E$:

$$\cot \left(\beta \frac{a}{2} \right) + \frac{\gamma}{\beta} \coth \left(\gamma \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (3.60)$$

Considerando $V < E$, representamos, respectivamente, das equações (3.17) e (3.27).

$$\psi_a^{max} = A \sin \left[\beta \left(x - \frac{a}{2} \right) \right], \quad (3.61)$$

e

$$\psi_b^{max} = C \sin \left[\theta \left(x + \frac{b}{2} \right) \right], \quad (3.62)$$

Ao repetir o procedimento anterior, determinamos a energia máxima para as bandas de

índice par quando $V < E$.

$$\cot\left(\beta\frac{a}{2}\right) + \frac{\theta}{\beta} \cot\left(\theta\frac{b}{2}\right) = 0. \quad (3.63)$$

Durante o desenvolvimento do formalismo alternativo, foram utilizadas exclusivamente as condições de contorno em $x = 0$, conforme expressas nas Eqs. (3.30) e (3.31). Este método difere do formalismo convencional, no qual suas condições, Eqs. (2.16), (2.17), (2.18) e (2.19), consideram não apenas $x = 0$, mas também a interface em $x = a$ e $x = -b$. A explicação para essa abordagem distinta reside na diferença fundamental entre os dois formalismos.

O formalismo convencional abrange todas as energias de 0 a ∞ , conforme indicado por Eqs. (3.1) e (3.2), nas quais ϕ pode assumir qualquer valor real de 0 a 2π para energias dentro das bandas, ou qualquer valor complexo para energias fora das bandas. Nesse contexto, não existem paridades definidas para ψ_a e ψ_b , e nenhuma relação de simetria é estabelecida entre $\psi_a(0)$ e $\psi_a(a)$, ou entre $\psi_b(-b)$ e $\psi_b(0)$. Portanto, na Fig. 6, as condições de contorno em $x = 0$ e $x = a$ divergem, exigindo a consideração de ambas as condições.

Em contrapartida, o formalismo alternativo concentra-se exclusivamente nas energias de borda das bandas, onde ϕ assume apenas os valores 0 ou $\pm\pi$. Dessa forma, ψ_a e ψ_b possuem paridades definidas. As relações $\psi_a(0) = \pm\psi_a(a)$ e $\psi_b(0) = \pm\psi_b(-b)$ indicam que a condição de contorno em $x = 0$, determinando a relação entre ψ_a e ψ_b , é análoga àquela em $x = a$. Essa é a justificativa pela qual apenas uma condição de contorno é necessária no desenvolvimento do formalismo alternativo.

Fazendo b ser muito grande, as Eqs. (3.37) e (3.48), e as Eqs. (3.54) e (3.60) degeneram respectivamente para

$$\tan\left(\beta\frac{a}{2}\right) - \frac{\gamma}{\beta} = 0, \quad (3.64)$$

para $n = 1, 3, 5, \dots$ e

$$\cot\left(\beta\frac{a}{2}\right) + \frac{\gamma}{\beta} = 0, \quad (3.65)$$

para $n = 2, 4, 6, \dots$. Naturalmente, estes resultados são iguais aos de uma único poço.

Na ilustração do formalismo alternativo, como pode ser visto na Fig. 7, foi considerado $a = 100\text{\AA}$, $b = 25\text{\AA}$, e $V = 375\text{ meV}$, mostrando assim as 5 primeiras bandas de energia. A curva (a) corresponde a função do lado esquerdo das Eqs. (3.37) e (3.43) e a curva (b) as da Eqs. (3.48) e (3.51). Já as curvas (c) e (d) correspondem as funções do lado esquerdo das Eqs. (3.54) e (3.57), e (3.60) e (3.63), respectivamente. Obviamente a curva (e) é obtida a partir do formalismo convencional, assim como mostrado na Fig.

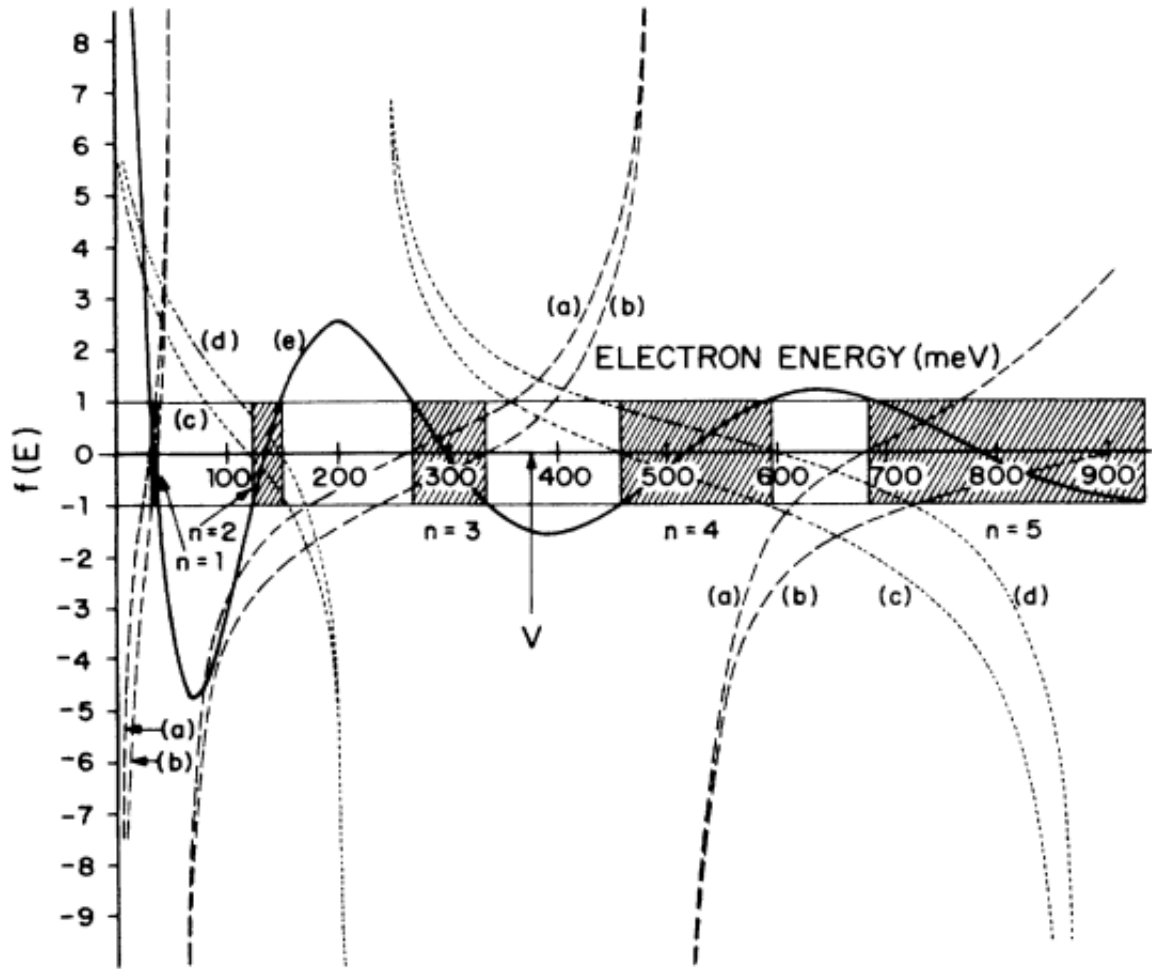


Figura 7: Gráfico retirado da Ref. [2] que ilustra as primeiras cinco subbandas de energia de elétrons de uma superrede GaAs/Al_xGa_{1-x}As, com parâmetros $x = 0,5$, $a = 100\text{\AA}$, $b = 25\text{\AA}$, e $V = 375\text{meV}$. n é o índice de banda. As curvas tracejadas (a) e (b) correspondem às funções no lado esquerdo das Eqs. (3.37) e (3.43), e (3.48) e (3.51), respectivamente. Já as curvas pontilhadas (c) e (d) correspondem às funções no lado esquerdo das Eqs. (3.54) e (3.57), e (3.60) e (3.63), respectivamente. A curva sólida (e) corresponde ao lado esquerdo das Eqs. (3.1) e (3.2).

4, e cruza o valor de $f(E) = 1$ ou -1 exatamente nos mesmos pontos no eixo E que as energias mínima e máxima encontradas nas curvas (a), (b), (c) e (d), indicando dessa maneira que as bandas de energias obtidas pelo formalismo alternativo são equivalentes às obtidas pelo tradicional, como é de se esperar. Embora tenhamos empregado curvas completas das funções dessas equações para deduzir as bandas de energia por meio do formalismo alternativo, este passo é frequentemente dispensável, pois as faixas de energia podem ser determinadas de maneira simplificada através de técnicas numéricas ou gráficos simples.

4 CONCLUSÕES

O objetivo deste estudo foi conduzir uma análise comparativa entre os dois formalismos do modelo de Kronig-Penney apresentados, visando identificar diferenças significativas e contribuir para o aprimoramento do entendimento dessas variações. Vale ressaltar que esta abordagem comparativa não é encontrada nos livros-texto tradicionais de física, conferindo, assim, um valor adicional a este trabalho no contexto do ensino de física do estado sólido.

No capítulo 2, desenvolvemos o formalismo convencional, onde a equação transcendental é rotineiramente encontrada a partir do determinante de uma matriz 4×4 , resultante de quatro condições de contorno na função de onda e sua derivada. Posteriormente, trabalhamos com o limite em que as barreiras tendem a deltas de Dirac, de forma que para chegar na equação desejada, tivemos apenas que passar por um determinante 2×2 . Diferente do convencional, temos apenas duas condições de contorno, sendo a continuidade da função de onda em $x = 0$ e a descontinuidade da primeira derivada nesse mesmo ponto.

No capítulo 3, desenvolvemos uma nova forma de obter as bandas de energia a partir de considerações de simetria. A simplicidade notacional da presente formulação é vantajosa quando uma forma alternativa da equação transcendental é derivada, Eqs. (3.37), (3.48), (3.54) e (3.60) para $V > E$ e (3.43), (3.51), (3.57) e (3.63) para $V < E$, sendo elas apenas em termos de tangentes, cotangentes e suas hiperbólicas para o primeiro caso e tangentes e cotangentes para o segundo. As novas equações imediatamente reduzem para a solução de um poço quadrado isolado no limite de espessura de barreira infinita, equações (3.64) e (3.65). Diferente da consideração do potencial delta de Dirac, aqui relacionamos as constantes A com C ao invés de A com B e seguimos uma lógica das paridades das funções de onda. Certamente isso causa bastante diferença pois a intenção do formalismo alternativo é manter $A=B$ ou $-B$ e $C=D$ ou $-D$ para assim trabalhar com as diferenças de fase de 0 ou $\pm\pi$.

Como vimos, o formalismo alternativo tem várias vantagens conceituais sobre a equação transcendental padrão e podem servir como uma alternativa aos tratamentos existentes. Destaca-se por sua simplicidade, elegância e pela determinação das funções de onda nas bordas de cada banda, uma capacidade não encontrada no formalismo tradicional. Este método facilita análises numéricas, cruciais para calcular bandas de energia e funções de onda. Ele é particularmente eficaz na análise de propriedades de super-redes, com destaque para a facilidade na identificação de energias de borda de banda em diversas estruturas.

REFERÊNCIAS

- [1] KRONIG, R. de L.; PENNEY, William George. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. **Proceedings of the royal society of London. series A, containing papers of a mathematical and physical character**, v. 130, n. 814, p. 499-513, 1931. DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1931.0019>
- [2] CHO, Hung-Sik; PRUCNAL, Paul R. New formalism of the Kronig-Penney model with application to superlattices. **Physical Review B**, v. 36, n. 6, p. 3237, 1987.
- [3] JENKINS, Tudor. A brief history of... semiconductors. **Physics education**, v. 40, n. 5, p. 430, 2005.
- [4] REZENDE, Sergio Machado. **Materiais e dispositivos eletrônicos**. Editora Livraria da Física, 2004.
- [5] MODELSKI, Józef; ROMANIUK, Ryszard. Electronics and telecommunications in Poland, issues and perspectives: Part I. Society and education. In: **Photonics Applications in Astronomy, Communications, Industry, and High-Energy Physics Experiments 2010**. SPIE, 2010. p. 27-42.
- [6] MADAKAM, Somayya et al. Internet of Things (IoT): A literature review. **Journal of Computer and Communications**, v. 3, n. 05, p. 164, 2015.
- [7] FERREIRA, Manuel Alberto M.; FILIPE, José A. Nanotechnology Applications—The Future Arrived Suddenly. **Computational Approaches in Biomedical Nano-Engineering**, p. 23-41, 2018.
- [8] ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, N. David. **Solid state physics**. Cengage Learning, 2022.
- [9] HODDESON, Lillian et al. (Ed.). **Out of the crystal maze: chapters from the history of solid state physics**. Oxford University Press, 1992.
- [10] NICHOLS, Kenneth Graham. **Transistor physics**. Springer Science Business Media, 2013.
- [11] CHIQUITO, Adenilson J.; LANCIOTTI JR, Francesco. Super-redes semicondutoras: um laboratório de mecânica quântica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, p. 315-322, 2004.
- [12] KITTEL, Charles. **Introduction to solid state physics**. John Wiley sons, inc, 2005.

- [13] BASSALO, José MF. A Crônica da Física do Estado Sólido: III Teoria de Bandas. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 16, p. 1-4, 1994.
- [14] HALLIDAY, David. **Fundamentos de Física: Óptica E Física Moderna**. Volume 4 . Grupo Gen-LTC, 2000.
- [15] GRIFFITHS, David Jeffrey; FREITAS, Lara. **Mecânica quântica**. Pearson Prentice Hall, 2011.
- [16] SOMROOB, Pattana; LIEWRIAN, Watchara. Electrical Manipulation of Spin-Dependent Anisotropy of a Dirac Cone in a Graphene Superlattice with Alternating Periodic Electrostatic and Exchange Fields. **Condensed Matter**, v. 8, n. 1, p. 28, 2023.
- [17] BLOCH, Felix. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. **Z. Phys**, v. 52, p. 555-600, 1928.
- [18] MEGHWAL, R. S. Mathematical Solution of Kronig-Penney Model Determinant **International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology (IJRASET)**, v. 8, p. 913-917, 2020. DOI: <https://doi.org/10.22214/ijraset.2020.32664>. Disponível em: <https://www.ijraset.com/files/serve.php?FID=32664>. Acesso em: 04 set. 2023.
- [19] IEZZI, Gelson; HAZZAN, Samuel. **Fundamentos de matemática elementar, 4: sequências, matrizes, determinantes, sistemas**. Atual, 2004.
- [20] BRUM, José Antônio. **Introdução à Física do Estado Sólido**. Palestra apresentada em 1º de março de 2010 no Departamento de Física da Matéria Condensada (DFMC), Universidade Estadual de Campinas, Campinas.
- [21] COSTA, Marconi; PAVAO, Antonio C. Supercondutividade: um século de desafios e superação. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 34, p. 2602-2615, 2012.
- [22] LANDIM, Claudio. Isolantes topológicos - Novos materiais e novas perspectivas tecnológicas!. **O globo**, 2018. Disponível em: <https://blogs.oglobo.globo.com/ciencia-matematica/post/isolantes-topologicos-novos-materiais-e-novas-perspectivas-tecnologicas.html>. Acesso em: 4 de nov. de 2023.
- [23] MAJOR, F. G.; MAJOR, F. G. Quartz clocks. **The Quantum Beat: Principles and Applications of Atomic Clocks**, p. 63-85, 2007.
- [24] OLIVEROS, Martín Emilio Mendoza. **Analítico/Estrutural/Propriedades de Nanocompósitos Cu-MWCNT**. 2012. Tese de Doutorado. PUC-Rio. p. 49-60.