



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE
CURSO DE FÍSICA-LICENCIATURA

EDUARDO SILVA DOS SANTOS

**ANÁLISE DA CONDUTÂNCIA QUÂNTICA EM NANOCONTATOS METÁLICOS:
um experimento simples para o ensino de física**

Caruaru
2019

EDUARDO SILVA DOS SANTOS

**ANÁLISE DA CONDUTÂNCIA QUÂNTICA EM NANOCONTATOS METÁLICOS:
um experimento simples para o ensino de física**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Graduação em Física-Licenciatura da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de licenciado em Física.

Área de concentração: Física do Estado Sólido.

Orientador: Profº. Dr. Luis Henrique Vilela Leão

Caruaru

2019

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Paula Silva - CRB/4 - 1223

- S237a Santos, Eduardo Silva dos.
Análise da condutância quântica em nanocontatos metálicos: um experimento simples para o ensino de física. / Eduardo Silva dos Santos. – 2019.
112 f. il. : 30 cm.
- Orientador: Luis Henrique Vilela Leão.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, Licenciatura em Física, 2019.
Inclui Referências.
1. Física – Experiências. 2. Teoria quântica. 3. Correntes elétricas. 4. Física (Ensino médio). I. Leão, Luis Henrique Vilela (Orientador). II. Título.
- CDD 371.12 (23. ed.) UFPE (CAA 2019-007)

EDUARDO SILVA DOS SANTOS

**ANÁLISE DA CONDUTÂNCIA QUÂNTICA EM NANOCONTATOSMETÁLICOS:
um experimento simples para o ensino de física**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Curso de Graduação em
Física-licenciatura da Universidade
Federal de Pernambuco, como requisito
parcial para a obtenção do título de
licenciado em Física.

Aprovada em: 30 / 01 / 2019.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Luis Henrique Vilela Leão (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Augusto César Lima Moreira (1º Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Gustavo Camelo Neto (2º Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Este trabalho é dedicado à minha mãe, ao meu pai, a minha irmã, a minha noiva, à memória da minha querida avó e a todos os meus amigos e amigas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a **DEUS**, pois sem ele nada disso seria possível. Chegar até aqui, sem dúvida, é uma grande benção em minha vida.

Agradeço também a minha mãe que sempre esteve ao meu lado, me apoiando e me incentivando nessa longa caminhada que foi concluir uma graduação. Ao meu pai, que esteve ao meu lado e me ajudou muito, sempre acreditando em mim e me orientando a se tornar o homem que sou hoje. A minha irmã, que também colaborou para alcançar meus objetivos. Agradeço de coração a minha querida noiva, que esteve comigo, e me ajudou demais em tudo que precisei, confiando que eu poderia conseguir chegar até aqui. Te amo muito!

Ao meu avô, que me apoio e acreditou em mim, seus ensinamentos foram muito importantes. Uma dedicatória especial à memória da minha querida avó.

Aos professores da minha graduação que fizeram seu trabalho com excelência. As discussões durante e depois das aulas me ajudam muito no entendimento de diversos conceitos necessários para a realização deste trabalho e para minha formação como Professor de Física. Em especial, agradeço ao professor Paulo Peixoto que fez um trabalho maravilhoso na disciplina de Termodinâmica e, com muita paciência, me ajudou a entender melhor esta disciplina, muito obrigado! Ao professor Gustavo, que ministrou a disciplina de Física Moderna e Mecânica Clássica, nossas discussões foram de suma importância para minha formação. Agradeço também ao professor Augusto, por fornecer algumas referências para este trabalho.

Aos meus amigos da graduação, Diego e Liliana, que estiveram comigo nesta longa jornada, possibilitando momentos muito agradáveis de estudo e de brincadeiras. Muito obrigado, gente! Levarei esta amizade para vida.

Agradeço a Daniel, técnico da eletrônica do Departamento de Física, que gentilmente me ajudou na montagem do circuito elétrico utilizado, teve muita paciência e me auxiliou em algumas conclusões teóricas.

Um agradecimento especial ao professor Luis Leão, que me orientou com muita paciência na construção deste trabalho, confiando em mim e depositando certa autonomia científica. Mais que um orientador, se tornou um amigo. Muito obrigado, Luis!

No mais, agradeço a todos que acreditaram em mim. Meu muito obrigado!

Tudo posso naquele que me fortalece.
Filipenses 4:13;

RESUMO

Segundo Ausubel, a utilização de atividades experimentais é de grande importância didática, pois, a depender da forma como são aplicadas, torna o processo de aprendizagem significativo, além de estimular o interesse dos alunos e sua curiosidade, fazendo a ligação entre teoria e prática. Especificamente, experimentos na área de mecânica quântica quase sempre são de difícil realização, pois necessitam de ambientes controlados (vácuo, temperatura, etc.). Neste contexto, o presente trabalho traz um experimento simples que se baseia no estudo de sistemas em dimensões nanométrica, que é atualmente de grande interesse tanto para estudo em física básica, devido aos efeitos quânticos, quanto às áreas tecnológicas, no desenvolvimento de certos componentes. Em particular, no decorrer deste trabalho é apresentado um efeito quântico interessante, que é o comportamento da condutância elétrica quando dois fios metálicos são postos em contato, formando contatos de dimensões nanométricas. Nessas condições, a condutância passa a variar em múltiplos inteiros de um quantum. A observação desse fenômeno pode ser feita utilizando uma montagem experimental relativamente simples, necessitando apenas da construção de um circuito elétrico amplificador, fios metálicos, e de um osciloscópio digital. Assim, quando os fios são postos perpendicularmente em contato surge uma resistência elétrica que, a depender das dimensões do contato, está relacionada diretamente ao quantum de condutância. A tensão que surge entre esse resistor (devido ao contato entre os fios) pode ser amplificada, utilizando um amplificador operacional, e medida por meio do osciloscópio digital. O experimento foi realizado utilizando fios metálicos de cobre e tungstênio, com diâmetros de 0,20mm e 0,25mm, respectivamente. Os resultados mostraram que de fato a condutância é quantizada em múltiplos de um quantum, evidenciando o comportamento quântico no contato formado entre os fios. Todavia, apareceram patamares intermediários, que são devidos a impurezas da rede. No entanto, isso não foi detalhado ao longo do trabalho, mas serve como base para pesquisas futuras. Por fim, a partir dos resultados obtidos, foi encontrado o valor para a constante de Planck em diferentes casos, que se mostrou com boa concordância experimental.

Palavras-chave: Experimentos em física. Condutância quântica. Efeitos quânticos. Formalismo de Landauer.

ABSTRACT

According to Ausubel, the use of experimental activities is of great didactic importance, since, depending on how they are applied, it makes the learning process meaningful, as well as stimulating students' interest and their curiosity, making the connection between theory and practice. Specifically, experiments in quantum mechanics are almost always difficult to perform because they require controlled environments (vacuum, temperature, etc.). In this context, the present work presents an experiment that is based on the study of systems in nanometric dimensions, which is currently of great interest both for study in basic physics, due to the quantum effects, as for the technological areas, in the development of certain components. In particular, in the course of this work an interesting quantum effect is presented, which is the behavior of the electrical conductance when two metallic wires are brought into contact, forming contacts of nanometric dimensions. Under these conditions, the conductance starts to vary in integer multiples of a quantum. The observation of this phenomenon can be done using a relatively simple experimental setup (making it feasible to use in the disciplines of Physics laboratories), requiring only the construction of an electric amplifier circuit, metallic wires, and a digital oscilloscope. Thus, when the wires are placed perpendicularly in contact, an electrical resistance arises that, depending on the dimensions of the contact, is directly related to the quantum of conductance. The voltage that arises between this resistor (due to the contact between the wires) can be amplified, using an operational amplifier, and measure by the digital oscilloscope. The experiment was carried out using copper and tungsten metal wires, with diameters of 0.20mm and 0.25mm, respectively. The results showed that in fact the conductance is quantized in multiples of a quantum, evidencing the quantum behavior in the contact formed between the wires. However, intermediate levels appeared, which are due to impurities of the network. This was not detailed throughout the paper, but serves as a basis for future research. Finally, from the results obtained, the value for Planck's constant was found in different cases, with good experimental agreement.

Keywords: Experiments in physics. Quantum conductance. Quantum effects.

Formalism of Landauer.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Trajetória dos elétrons de condução (bolinhas pretas) colidindo com os íons fixos da rede, sob ação de um campo elétrico \vec{E} , de acordo com o modelo de Drude. Também é representado o tempo médio entre as colisões, τ	30
Figura 2 –	Elétron se movendo em um fio condutor	32
Figura 3 –	A região cinza (esfera de Fermi) representa os vetores de onda ocupados no gás de elétrons livres. Os elétrons mais energéticos, localizados na superfícies de Fermi, têm energia $E_F = \hbar k_F^2/2m$ e vetor de onda de módulo k_F	38
Figura 4(a)–	Função de distribuição de Fermi-Dirac para $T = 0K$	41
Figura 4(b) –	Função de distribuição de Fermi-Dirac para $0 < T < T_F$	41
Figura 5 –	A esfera de Fermi contém os orbitais ocupados do espaço \vec{k} no estado fundamental de um gás de elétrons. O momento linear total é zero, pois para cada estado \vec{k} ocupado existe um correspondente $-\vec{k}$ também ocupado, o que torna $\sum \vec{k} = 0$ e consequentemente uma corrente elétrica nula. Sob a influência de uma força \vec{F} agindo durante um intervalo de tempo t , os vetores de onda de todos os orbitais aumentam de $\delta\vec{k} = \vec{F}t/\hbar$. Isto equivale a deslocar de $\delta\vec{k}$ toda a esferade Fermi. O momento linear total dos elétrons passa a ser $N\hbar\delta\vec{k}$	43
Figura 6 –	Ilustração de um espalhamento unidimensional. No lado esquerdo há um potencial constante \mathcal{V}_L . Na região do meio é onde ocorre o espalhamento da onda. Na região direita o potencial é novamente constante \mathcal{V}_R . É mostrado as três ondas: no lado esquerdo a onda incidente, com amplitude A e a refletida, com amplitude B . Do lado direito a onda transmitida, com amplitude F	48

Figura 7 –	Representação de uma junção túnel. As esferas amarelas representam o metal e as esfera azuis representam o isolante. As ondas de matéria no metal são refletidas e/ou transmitidas devido ao isolante. Fonte: (BROCKS, 2005, p. 50)	50
Figura 8 –	Aproximação simplificada do potencial da junção Túnel. O potencial no metal da região da esquerda é mantido a um valor constante de \mathcal{V}_L e o potencial do metal na região da direita é mantido a um valor constante de $\mathcal{V} = \mathcal{V}_R$. O potencial na região do meio é constante de valor \mathcal{V}_0 . A onda incidente tem amplitude A , a onda refletida tem amplitude B e a onda transmitida tem amplitude F	51
Figura 9 –	Potencial da junção Túnel quando há uma diferença de potencial aplicada entre as regiões da esquerda e da direita	51
Figura 10 –	Ilustração do potencial de um fio longo, onde as extremidades do fio são demarcadas por $-L/2$ e $L/2$. Como o fio é muito longo, o espectro de energia é aproximadamente contínuo. E_F marca o nível de energia de Fermi	53
Figura 11 –	Potencial da junção Túnel com os estados preenchidos até o nível de Fermi. Como estamos considerando a situação com $T = 0K$, o gás de elétrons (o metal) possui estados completamente preenchidos, impossibilitando a passagem de elétrons de um lado para o outro. O princípio da exclusão limita a quantidade em apenas dois elétrons por estado	55
Figura 12 –	Junção Túnel sob aplicação de uma diferença de potencial. Note que agora há estados desocupados, de modo que os elétrons da região esquerda podem agora atravessar a barreira e ocupar esses estados	56
Figura 13 –	Generalização da barreira quadrada. Nas regiões da esquerda e da direita o potencial é constante. Na região	

	do meio o potencial também é constante. É representado as ondas incidente, refletida e transmitida.....	58
Figura 14 –	Ilustração da junção de túnel. Pode-se notar que a dimensão do dispositivo da junção na direção \hat{x} é menor que as dimensões na direção \hat{y} e na direção \hat{z}	59
Figura 15 –	Dispersão de uma barreira quadrada no plano $(k_x, k_{ })$. Fonte: (BROCKS, 2005, p. 27)	61
Figura 16 –	Junção túnel quadrada. Representação da densidade de corrente elétrica \vec{j}	64
Figura 17 –	Comparação qualitativa da dependência da condutância da seção transversal na descrição clássica (linha tracejada) e quântica (linha preenchida). Fonte: (RODRIGUES; UGARTE, 1999).....	68
Figura 18 –	Ilustração para os diferentes regimes de condução. (a) no regime difusivo, os elétrons se espalham muitas vezes enquanto estão na constrição. (b) no regime balístico podemos considerar não havendo espalhamento e o elétron é acelerado livremente. (c) a largura da constrição torna-se semelhante ao comprimento de onda de <i>de Broglie</i> dos elétrons na superfície de Fermi. Neste caso forma-se ondas estacionárias na direção transversal a corrente, o que limita o número de canais de condução ...	69
Figura 19 –	Representação de um fio retangular com dimensões transversais (L_x, L_y) quantizadas. Ao lado direito do fio, tem-se as sub-bandas de energia do sistema, considerando o limite em que a energia varia continuamente em z , o que significa dizer que $L_z \gg L_x, L_y$. Fonte: (BALDO, 2011, p. 62)	70
Figura 20 –	Circuito elétrico amplificador de sinal para medida da condutância quântica.....	72
Figura 21 –	Ilustração de uma possível medida no osciloscópio	75
Figura 22 –	Parte elétrica do aparato experimental	77
Figura 23 –	Medida da condutância quântica. Metodologia 1	78

Figura 24 –	Oscilação dos fios justapostos fazendo e desfazendo nanocontatos. A observação é feita em um osciloscópio digital com a função single ainda desligada.....	78
Figura 25 –	Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio	79
Figura 26 –	Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio. Aqui há, aparentemente, mais canais, mas com alguns não estão formando degraus tão perfeitos	79
Figura 27 –	Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio. Aqui, pode ser observado mais aparentemente as oscilações devido ao setting time do amplificado operacional	80
Figura 28 –	Medidas de condutância quântica. Metodologia 2.....	81
Figura 29 –	Parte mecânica da medida de condutância quântica. Na figura podemos ver também um protoboard, que foi utilizado, a priori, para reduzir a vibração do micromotor, mas, por fim, foi mantida apenas a função PWM do arduíno	81
Figura 30 –	Medidas típicas de condutância quântica para o cobre	84
Figura 31 –	Mais algumas medidas típicas de condutância quântica para o cobre.....	85
Figura 32 –	Representação na forma de histograma das curvas de condutância para o cobre, num total de 525 patamares analisados.....	86
Figura 33 –	Medidas típicas de condutância quântica para fios de tungstênio	87
Figura 34 –	Representação na forma de histograma das curvas de condutância para o tungstênio, num total de 526 patamares analisados.....	88
Figura 35 –	Construção e desconstrução dos canais de condutância até chegar ao nível clássico. Temos a vista lateral e superior dos fios superpostos perpendicularmente	89
Figura 36 –	Montagem do circuito elétrico impresso	96

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Energias de Fermi, temperaturas de Fermi, vetores de onda de Fermi e velocidades de Fermi para alguns metais à temperatura ambiente.....	40
Tabela 2 –	Valores para a resistência no nanocontato e os valores do ganho associado a cada valor da resistência	75
Tabela 3 –	Valores da tensão média de saída para o cobre, relativa a cada canal de condutância n , os valores experimentais relativos a condutância quântica e valores obtidos para a constante de Planck h acompanhado do erro relativo, utilizando para h o valor de referência $6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ e $e = 1.602 \times 10^{-19}$	86
Tabela 4 –	Valores da tensão média de saída para o Tungstênio para cada canal de condutância n , os valores experimentais relativos a condutância quântica e valores obtidos para a constante de Planck h acompanhado do erro relativo, utilizando para h o valor de referência $6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ e $e = 1.602 \times 10^{-19}$	88

LISTA DE SÍMBOLOS

k_B	Constante de Boltzmann
e	Carga Elementar do Elétron
σ	Condutividade Elétrica
κ	Condutividade Térmica
v_d	Velocidade de Deriva
\vec{J}	Vetor Densidade Superficial de Corrente Elétrica
\vec{E}	Vetor Campo Elétrico
m	Massa do Elétron
τ	Tempo Médio Entre Colisões
ρ	Resistividade Elétrica
ΔV	Diferença de Potencial Elétrico
R	Resistência Elétrica
I	Corrente Elétrica
G	Condutância Quântica
n	Número de Elétrons por Unidade de Volume
E	Nível de Energia do Sistema
\hbar	Constante de Planck / 2π
\vec{k}	Vetor de Onda
\vec{p}	Momento Linear
ψ	Função de Onda Quântica
v_F	Velocidade no nível de Fermi
E_F	Energia de Fermi
\mathcal{U}	Energia Interna de um Gás
μ	Potencial Químico
\mathcal{J}	Corrente de Probabilidade
\mathcal{V}	Energia Potencial Elétrica
V	Volume
U_{in}	Tensão de Entrada do Circuito Elétrico
U_{out}	Tensão de Saída do Circuito Elétrico
r_n	Resistência Elétrica no Nanocontato

\mathcal{T}	Coeficiente de Transmissão
\mathcal{R}	Coeficiente de Reflexão
\mathcal{G}	Ganho do Amplificador Operacional

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
2	OBJETIVOS	21
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA: Ensino de Física e Aprendizagem Significativa Utilizando Atividades Experimentais	22
3.1	EXPERIMENTAÇÃO E ENSINO DE FÍSICA.....	22
3.2	TEORIA DA APRENDIZAGEM DE DAVID AUSUBEL	23
3.3	UTILIZAÇÃO DE ATIVIDADES EXPERIMENTAIS VIA TEORIA DE DAVID AUSUBEL	26
3.4	PAPEL DO PROFESSOR COMO MEDIADOR DO CONHECIMENTO	27
4	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA: Teoria da Condução Eletrônica e Quantização da Condutância	29
4.1	MODELO DE DRUDE	29
4.2	CONDUTIVIDADE ELÉTRICA	31
4.3	CONDUTÂNCIA ELÉTRICA.....	33
4.4	MODELO DE SOMMERFELD	34
4.5	DISTRIBUIÇÃO DE FERMI-DIRAC.....	40
4.6	CONDUTIVIDADE ELÉTRICA VIA MODELO DE SOMMERFELD	42
4.7	CORRENTES QUÂNTICAS	44
4.8	CONDUTÂNCIA QUÂNTICA	50
4.8.1	Junção de Túnel	50
4.8.2	A Fórmula de Landauer.....	52
4.8.3	Derivação da Fórmula de Landauer em 1D	53
4.8.4	Derivação da Fórmula de Landauer em 3D	58
4.8.5	Transporte de Carga em um Fio com Constrição.....	64
4.8.5.1	Limite Clássico	66
4.8.5.2	Limite Semi-clássico	66
4.8.5.3	Limite Quântico (nanofio)	67
5	METODOLOGIA	72
6	RESULTADOS.....	84
7	DISCUSSÕES	89

7.1	MEDIDAS DE CONDUTÂNCIA	89
7.2	DESEMPENHO DO APARATO EXPERIMENTAL	90
7.3	CURVAS MEDIDAS	91
8	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	95
9	ATIVIDADES PARALELAS DESENVOLVIDAS.....	96
	REFERÊNCIAS	97
	APÊNDICE A – FOTOS DO EXPERIMENTO	102
	APÊNDICE B – PROGRAMA PARA CONTROLE DO PWM	103
	APÊNDICE C – ROTEIRO EXPERIMENTAL PARA MEDIDA DA	
	QUANTIZAÇÃO DA CONDUTÂNCIA	104

1 INTRODUÇÃO

No ensino de ciências, de uma forma geral, é interessante que o professor consiga trazer para aluno uma aprendizagem que seja de fato significativa, isto é, que o aluno consiga construir os novos conceitos em sua estrutura cognitiva baseados nos seus conhecimentos prévios. Contudo, a depender do conteúdo, se torna bastante complicado trazer isso à tona apenas por meio de aulas puramente expositivas.

Geralmente a abordagem da Física está relacionada à mera aplicação de fórmulas e resolução de problemas que já estão prontos, fazendo com que os alunos não os criem nem os investiguem para resolvê-los (BORRAGINI, 2018). Sendo assim, torna-se difícil ocorrer uma aprendizagem significativa, os alunos simplesmente decoram tudo e alguns dias depois acabam por esquecer o que foi ensinado.

Em alguns casos, torna-se mais difícil de ensinar alguns conceitos utilizando aulas puramente expositivas, como, por exemplo, ensinar o conceito de campo, de corrente elétrica, resistência elétrica, ou até mesmo conceitos de Mecânica Quântica. Portanto, cabe ao professor estimular os alunos através de materiais didáticos diferentes, como o uso de atividades experimentais.

No que se refere a experimentos em Mecânica Quântica, sua maioria envolve medidas experimentais que necessitam de aparelhos bastante sensíveis, em condições especiais (como o alto-vácuo, baixa temperatura), por isso são geralmente de alto custo financeiro, trabalhosos e de difícil interpretação (RODRIGUES; UGARTE, 1999).

Neste contexto, o experimento que propomos neste trabalho é baseado no trabalho de Costa-Krämer (Costa-Krämer, 1995), que utiliza a formação espontânea de estruturas nanométricas entre fios macroscópicos justapostos para analisar o comportamento da condutância elétrica. Classicamente, a condutância elétrica é diretamente proporcional a área da seção transversal e inversamente proporcional ao comprimento do fio. Mas o que aconteceria se diminuíssemos a área da seção transversal a níveis nanométricos? E se ao mesmo tempo o comprimento do fio fosse menor que o livre caminho médio dos elétrons, o que aconteceria com a condutância? A análise teórica feita via formalismo de Landauer mostra que a condutância passa a variar em etapas discretas, ao invés de contínuas (TOLLEY et al., 2013), tornando-se múltiplas de um quantum, o que foi comprovado experimentalmente.

Normalmente experimentos com nanofios são feitos usando outras técnicas experimentais bem mais sofisticadas do que as utilizadas neste trabalho, mas ainda assim os resultados obtidos são bastante semelhantes.

O aparato experimental proposto é relativamente simples e de fácil aquisição, sendo composto de um pequeno circuito elétrico amplificador, fios (que são postos em contato) e um osciloscópio digital. Ao encostar dois fios perpendicularmente podemos fazer passar uma corrente elétrica e analisar o comportamento da resistência ao encostar e desencostar esses fios. A medida que as dimensões do contato formado entre os fios se tornam nanométricas, o comportamento ondulatório é o mais adequado para caracterizar o transporte de carga. Sendo assim, o nanocontato se comporta como um guia de onda, que tem influência direta na quantização da condutância (RODRIGUES; UGARTE, 1999) que passa a variar em múltiplos de um quantum, evidenciando o comportamento quântico.

Os experimentos desenvolvidos e descritos neste trabalho seguem uma análise qualitativa e quantitativa da quantização da condutância em nanocontatos metálicos de cobre e tungstênio formados pela justaposição de dois fios. Este experimento foi utilizado para elaborar uma proposta de ensino partindo de concepções cognitivistas, como as de Ausubel, propondo um roteiro experimental que permita ao aluno uma atividade investigativa do fenômeno em questão.

Pela praticidade e os bons resultados experimentais, além do grande potencial didático, o experimento proposto pode ser facilmente utilizado nas disciplinas de laboratórios didáticos de Física, facilitando que a aprendizagem seja significativa.

De forma didática, os tópicos, que se seguem, podem ser brevemente resumidos da seguinte maneira:

No tópico 2 são apresentados os objetivos gerais e específicos do trabalho. Na Fundamentação Teórica, inicialmente, no tópico 3.1 apresentamos uma breve discussão sobre a importância de experimentos para o ensino de Física, trazendo aspectos relevantes para o processo de ensino-aprendizagem. Logo após, no tópico 3.2 é apresentado o marco teórico escolhido que embasa a estrutura pedagógica deste trabalho, que é a teoria da aprendizagem significativa de David Ausubel, onde é discutido os principais elementos que caracterizam uma aprendizagem significativa. No tópico 3.3 a importância das atividades experimentais para o ensino de Física à luz dessa teoria e 3.4 o papel do professor como mediador. Em seguida, no tópico 4.1 é discutido a teoria da condução elétrica a partir do modelo de Drude, onde é usado a

aproximação do elétron não interagente e usado a teoria cinética dos gases para modelar o movimento dos elétrons em um fio. No tópico 4.2 é definida a condutividade elétrica e em seguida, no tópico 4.3, a condutância elétrica. No tópico 4.4, dando continuidade à teoria da condução elétrica, é usado o modelo de Sommerfeld, onde agora o elétron é considerado como uma onda de probabilidade. No 4.5, é abordado resumidamente a distribuição de Fermi-Dirac. No 4.7, discutido os conceitos relativos as correntes quânticas. No 4.8, abordado a condutância quântica, tanto em 1D, quanto em 3D, via formalismo de Landauer. Em seguida, são apresentados os limites clássico, semi-clássico e quântico para a condutância elétrica.

Na Metodologia, é apresentado como foi obtido os resultados deste trabalho, como a obtenção das curvas de condutância e da constante de Planck. E, logo após, são apresentados os resultados obtidos no experimento.

Por fim, as considerações finais, onde deixamos claro as contribuições relevantes deste trabalho.

2 OBJETIVOS

Classicamente se espera que a condutância varie linearmente com a seção transversal do fio e seja inversamente proporcional ao seu comprimento. Mas, e se diminuirmos a seção transversal cada vez mais, o que pode acontecer? Será que a condutância ainda irá depender diretamente de fatores geométricos, como a área e o comprimento?

Nesta perspectiva, o objetivo geral deste trabalho é a construção de uma montagem experimental que permita a criação de contatos metálicos, onde fenômenos quânticos tornam-se preponderantes. Em particular, pretendemos observar a quantização da condutância utilizando fios metálicos justapostos, formando nanocontatos de dimensões da ordem do comprimento de onda dos elétrons na superfície de Fermi. Esse aparato experimental pode ser facilmente montado por estudantes de graduação, pois os materiais necessários são de fácil obtenção, podendo ser utilizado em laboratórios didáticos de Física.

Especificamente, pretendemos analisar a quantização da condutância em fios metálicos de cobre e tungstênio, onde esperamos observar os canais de condutância e assim fazer as devidas análises dos dados utilizando modelos físicos já existentes na literatura. Com isso, é possível obter também a constante de Planck, com certa precisão.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA: Ensino de Física e Aprendizagem Significativa Utilizando Atividades Experimentais

3.1 EXPERIMENTAÇÃO E ENSINO DE FÍSICA

A Física é uma ciência essencialmente experimental, seja a partir de observações de fenômenos naturais ou da produção de experimentos controlados em laboratório. Estes experimentos são projetados para que certos fenômenos sejam observados sob condições controladas, de forma que seja possível, por exemplo, fazer testes e previsões teóricas.

Uma atividade experimental é, sem dúvida, uma importante ferramenta para o ensino de Física e de Ciências de uma forma geral. A atividade experimental é algo indispensável no ensino de Física e esse tipo de atividade pode ser orientada para a consecução de diferentes objetivos. Dentre os objetivos, pode-se tomar como essencial, que atividades experimentais fazem uma “ponte” entre o que está sendo visto em sala de aula, como modelos simplificados, com toda a complexidade do mundo real (LEIRIA; MATARUCO, 2015), e, segundo Araujo e Abib (2003, p. 176):

[...] O uso de atividades experimentais como estratégia de ensino de Física tem sido apontado por professores e alunos como uma das maneiras mais frutíferas de se minimizar as dificuldades de aprender e de se ensinar Física de modo significativo e consistente.

Nos cursos de Física, boa parte das disciplinas estão voltadas a conteúdos da Física clássica, que tange com o mundo macroscópico. Dessa maneira, os estudantes assimilam melhor as ideias com coisas concretas. Assim, entender o mundo quântico se torna um grande desafio. Nesse momento, a realização de experimentos de Mecânica Quântica constitui-se um poderoso recurso instrucional e instrumental para possibilitar a visualização do que acontece na prática, além de despertar habilidades técnicas de investigação experimental. Portanto, a experimentação nesse sentido surge para estreitar o elo com a teoria e traz um caráter motivador ao aluno para o estudo da Física (ALVES, 2006), além de ser uma excelente ferramenta didática que diminui o nível de abstração dos conteúdos trabalhados pelos

professores em sala de aula. De acordo com as orientações curriculares do estado da Bahia (2005 apud LEIRIA; MATARUCO, 2015, p. 32216):

A experimentação é imprescindível durante a apresentação dos conteúdos das disciplinas da área de Ciências da Natureza e Matemática. No caso particular da Física, é um recurso utilizado para materializar um conceito, tornando-se um facilitador da abstração.

Convém ressaltar que a utilização de atividades experimentais servem para melhor desenvolver a compreensão de determinados conceitos, além de fazer o aluno sair da postura passiva e começar a perceber e agir sobre o seu objeto de estudo, relacionando-o com o acontecimento e buscando as causas dessa relação, procurando, portanto, uma explicação causal para o resultado de suas ações e/ou interações (AZEVEDO, 2004).

3.2 APRENDIZAGEM SIGNIFICATIVA DE DAVID AUSUBEL

Visto a importância da experimentação para o ensino de Física, vamos embasá-la segundo a teoria de David Ausubel. Psicólogo, sempre preocupado com o processo de aprendizagem humana, desenvolveu uma importante teoria da aprendizagem, denominada de Teoria da Aprendizagem Significativa (LEIRIA; MATARUCO, 2015).

A teoria apresenta um enfoque cognitivista, pois se embasa em princípios organizacionais da cognição humana, buscando valorizar o conhecimento prévio do aluno e o entendimento das informações, para que as mesmas não sejam apenas memorizadas, mas se apoiem e interajam com os conhecimentos já existentes na estrutura cognitiva do indivíduo.

Segundo Ausubel, os conhecimentos prévios que os alunos trazem em sua estrutura cognitiva devem ser valorizados pelos professores, pois servem como âncora para a formulação e construção de novos conhecimentos. Segundo ele, a aprendizagem pode ocorrer de duas maneiras: aprendizagem mecânica ou aprendizagem significativa.

A aprendizagem mecânica ocorre quando a mesma se dá apenas de forma arbitrária ou literal, com pouca ou nenhuma associação a conceitos previamente estabelecidos na estrutura cognitiva do sujeito. Nesse caso, não há interação dos novos conceitos com os previamente estabelecidos e assim a aprendizagem é dita mecânica, não significativa, ou puramente automática (MOREIRA, 2012).

No entanto, em alguns momentos esse tipo de aprendizagem é inevitável, sendo necessária para estabelecer certos conceitos e servirem de base para a construção de novos conhecimentos.

A aprendizagem significativa por sua vez, é um processo caracterizado pela construção de conhecimentos baseados no que o aluno já conhece. Os novos conhecimentos adquiridos interagem significativamente com os subsunçores, que o indivíduo possui. Assim, segundo Moreira (MOREIRA, 2012, p. 2, tradução nossa)¹:

Aprendizagem significativa é aquela em que ideias expressas simbolicamente interagem de maneira substantiva e não-arbitrária com aquilo que o aprendiz já sabe. Substantiva quer dizer não-literal, não ao pé-da-letra, e não-arbitrária significa que a interação não é com qualquer ideia prévia, mas sim com algum conhecimento especificamente relevante já existente na estrutura cognitiva do sujeito que aprende.

Em suma, subsunçor pode ser entendido como um conhecimento específico que existe na estrutura cognitiva do indivíduo, que permite dar significado a novos conhecimentos, isto é, serve como ideia âncora para apoiar os conhecimentos que lhe são apresentados ou por ele descobertos (MOREIRA, 2012).

Segundo Ausubel (1963, p. 58, apud MOREIRA; PALMERO; CABALLERO, 1997, 2), a aprendizagem significativa é o mecanismo humano, por excelência, para adquirir e armazenar grande quantidade de ideias e informações, independente do campo de conhecimento. Por exemplo, os conhecimentos prévios sobre a fenomenologia da Lei de Ohm, condutância elétrica, resistência elétrica, corrente elétrica, entre outros, certamente servem de subsunçores para entender a quantização da condutância, dando-lhe mais estabilidade cognitiva e talvez maior clareza. O subsunçor quantização da condutância poderá servir de ideia-âncora para entender outros fenômenos semelhantes presentes na Física de uma modo geral.

¹ Aprendizaje significativo es aquél en el que ideas expresadas simbólicamente interactúan de manera substantiva y no arbitraria con lo que el aprendiz ya sabe. Substantiva quiere decir no literal, que no es al pie de la letra, y no arbitraria significa que la interacción no se produce con cualquier idea previa, sino con algún conocimiento específicamente relevante ya existente en la estructura cognitiva del sujeto que aprende.

Progressivamente os subsunçores vão ficando mais estáveis e mais ricos em significados, podendo cada vez mais facilitar novas aprendizagens (MOREIRA, 2012). Como exemplo, poderíamos pensar no conceito de força. Qualquer criança tem esse conceito formado antes de chegar à escola, assimilando-o a esforço físico. Entretanto, mais adiante aprenderá que existem tipos de força na natureza, como a força eletromagnética, força gravitacional, e essas serão aprendidas baseadas no subsunçor força. Então, esse subsunçor se tornou mais rico, com um maior significado, não apenas entendido como um esforço físico, mas também como atração devido a cargas elétricas de sinais opostos, a massa dos corpos, etc.

Quando a modificação do subsunçor é bastante acentuada fala-se em *subsunção derivativa* (MOREIRA, 2012), quando apenas corrobora, reforça o subsunçor, usa-se o termo *subsunção correlativa* (MOREIRA, 2012). Por exemplo, quando um aluno de Física estuda a quantização da carga elétrica e posteriormente observa esses fenômeno de quantização na condutância, no momento angular, etc., certamente essa subsunção é *correlativa*. Em contrapartida, se o mesmo aluno estuda sobre energia potencial e cinética e confirma a conservação da energia mecânica, a subsunção é *derivativa*. Assim, um subsunçor pode ser ampliado, facilitando e auxiliando para que ocorra uma aprendizagem significativa.

No entanto, nem sempre é assim. Subsunçores podem funcionar como bloqueador, um obstáculo epistemológico, como afirma Gaston Bachelard (MOREIRA, 2012). Por exemplo, pensar na estrutura da matéria como esferas rígidas e maciças pode atrapalhar de certa maneira o entendimento de conceitos da Mecânica Quântica. Logo, nem sempre os conhecimentos prévios se tornam um mecanismo facilitador para a aprendizagem significativa (MOREIRA, 2012).

É interessante esclarecer que a aprendizagem significativa não é sinônimo de aprendizagem “correta”, mas são mais resistentes a mudanças conceituais, visto que estão interligadas a outros conhecimentos na estrutura cognitiva, por isso sua importância. (MOREIRA, 2012)

Em essência, são duas as condições para a aprendizagem significativa (MOREIRA, 2012): 1) o material de aprendizagem deve ser potencialmente significativo² e 2) o aprendiz deve apresentar uma predisposição para aprender. A primeira condição implica que o material de aprendizagem, seja ele livros, aulas,

² Potencialmente significativo, pois os significados estão nas pessoas e não nos materiais. Não existe livro significativo, nem experimento significativo, etc. (MOREIRA, 2012)

roteiros experimentais, etc., tenha significado lógico (ou seja, que se relacione aos conhecimentos prévios do indivíduo) e a segunda, que o aprendiz tenha em sua estrutura cognitiva ideias-âncora relevantes com as quais esse material possa ser relacionado. Isto é, o material deve ser relacionável a estrutura cognitiva e o aprendiz deve ter os subsunçores necessários para fazer esse relacionamento de forma não-arbitrária e não-literal (MOREIRA, 2012).

3.3 UTILIZAÇÃO DE ATIVIDADES EXPERIMENTAIS VIA TEORIA DE DAVID AUSUBEL

Como podemos relacionar atividades experimentais a aprendizagem significativa? Muitos trabalhos sugerem que as atividades experimentais constituem um dos recursos mais significativos no Ensino de Física (BORRAGINI, 2008). Todavia, os roteiros que são utilizados nos laboratórios didáticos de física geralmente são caracterizados por uma aprendizagem mecanicista, servindo apenas como uma “receita de bolo”, ditando procedimentos para comprovações de Leis ou teorias previamente estudadas, mas sem nenhuma indagação instigante ou motivadora (BORRAGINI, 2008). Atividades que fomentem dúvidas, e discussões são as mais relevantes. Caso não seja dessa maneira, as atividades experimentais não irão garantir uma qualificação necessária e suficiente sobre método científico³ (LEIRIA; MATARUCO, 2015). Ausubel ainda deixa claro que não basta ter um laboratório com vários equipamentos e materiais de experimentação, pois mesmo com todo esse aparato não há nenhuma garantia de que as atividades experimentais irão proporcionar uma aprendizagem significativa (LEIRIA; MATARUCO, 2015).

Para construir atividades experimentais que visem a aprendizagem significativa, pode-se desenvolver alguns questionamentos que servirão tanto como orientação durante o processo experimental, como oportunidade para os alunos testarem suas hipóteses (LEIRIA; MATARUCO, 2015).

³ Entende-se o método científico como um conjunto de orientações gerais que facilita ao cientista planejar sua investigação, formular suas hipóteses, realizar suas experiências e interpretar seus resultados, com objetivo de construir novos conhecimentos, ou mesmo ampliar os conhecimentos já existentes. Todavia, isso não quer dizer que sejam orientações infalíveis. O método científico pode ser aperfeiçoado. (GALLIANO, 1979)

Portanto, os experimentos devem ser realizados levando em consideração os conhecimentos prévios que os alunos possuem (seus subsunçores), fazendo-os questionar, discutir ideias e criar interações cognitivas entre os conceitos vistos no experimento com os que foram aprendidos em sala de aula. Assim, nos dizeres de Ausubel (ASUBEL, 1978, p. 4, apud MOREIRA, 1999, p. 163): “[...] o fator mais importante que influencia a aprendizagem é aquilo que o aluno já sabe. Descubra isso e ensine-o de acordo”.

3.4 O PAPEL DO PROFESSOR COMO MEDIADOR DO CONHECIMENTO

Dicussões sobre o processo de ensino-aprendizagem em Física é um assunto que vem sendo debatido desde o ano de 1970, quando houve o primeiro Simpósio Nacional de Ensino de Física (SNEF) que reuniu diversos pesquisadores da área na cidade de São Paulo (LEIRIA; MATARUCO, 2015). Desde esse ano, o tema ganha destaque em eventos nacionais sobre educação.

Durantes esses anos, as pesquisas mostraram que a Física ainda continua com uma conotação empirista-indutivista, onde as atividades seguem o processo tradicional de ensino (LEIRIA; MATARUCO, 2015). Em oposição à forma tradicional de ensino, surgem conceitos como o de professor mediador. O professor mediador é aquele que participa efetivamente com o aluno na construção do conhecimento, não sendo apenas aquele professor tradicional, em que seu papel é apenas o de transmissor de informações contidas em livros didáticos. O professor mediador, ocupará um papel de intermediário entre os alunos e o conhecimento, orientado-o no processo de aprendizagem (BOPP, 2013). Este professor não considera o aluno apenas como uma tábula rasa (como tradicionalmente ocorre), mas sim que o aluno traz consigo conhecimentos prévios que podem ser potencializados (ou modificados) e aproveitados da melhor forma possível no desenvolvimento de novos conhecimentos.

Além disso, o professor mediador, devido a diferenciação nas metodologias de ensino-aprendizagem usuais, pode estimular seus alunos para que os mesmos possam desenvolver maior capacidade crítica frente as questões propostas, além de propiciar certa autonomia científica e caráter motivador. Nesse sentido, Freire (1996,

p. 58, apud BOPP, 2013, p. 12) aponta que: “No fundo, o essencial nas relações entre o educador e o educando, entre autoridade e liberdades, entre pais, mães e filhas é a reivenção do ser humano no aprendizado de sua autonomia”.

Portanto, na realização de atividades experimentais, é importante que o professor forneça certa autonomia científica ao aluno, e que participe das discussões relevantes sobre os experimentos, não fornecendo diretamente as respostas para as questões pertinentes, mas auxiliando o aluno na busca de soluções mais adequadas para elas.

4 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA: Teoria da Condução Eletrônica e Quantização da Condutância

4.1 MODELO DE DRUDE

No final do século XIX, mais precisamente no ano de 1897, J.J Thomson mostrou que os raios que faziam cintilar a parede de vidro dos tubos de raios catódicos eram feixes de partículas com cargas negativas. Este descobrimento causou grande impacto nas teorias da época sobre a estrutura da matéria e sugeriu um novo mecanismo para a condução elétrica dos metais. Como os metais conduzem tão facilmente, era de se esperar que existissem partículas que pudessem se movimentar com relativa liberdade. (TIPLER; LLEWELLYN, 2010; PÉREZ, 2000)

Com essa descoberta, então, era possível admitir, por exemplo, que essas partículas poderiam ser elétrons livres. Assim, como o cobre conduz muito melhor que o silício, então o cobre teria muito mais elétrons livres por unidade de volume do que o silício. Enquanto que o quartzo, um isolante, teria uma quantidade ínfima de elétrons livres, quando comparado ao cobre. (ALCACÉR, 2013)

Algumas questões foram levantadas na época, como, por exemplo, de que modo era a relação entre temperatura e resistência elétrica. No cobre, ao aumentar a temperatura, era notado uma dificuldade maior para a condução elétrica. Será que o número de elétrons varia com a temperatura? Ou a velocidade que varia com a temperatura? Ou ambos? De que modo? (ALCACÉR, 2013)

Algumas respostas foram dadas pelo físico alemão Paul Karl Ludwig Drude, em 1900. O seu modelo consistia em admitir que, num metal, alguns elétrons se libertavam dos átomos e ficavam “livres”, enquanto os íons ficavam fixos. A resistência elétrica seria devida a colisões entre os elétrons e os íons fixos. Nesse modelo, supõem-se desprezíveis as interações entre elétron-elétron e elétron-íon, a não ser durante uma “colisão”. Além disso, o tempo de uma colisão é também desprezível. Por esse motivo, esse modelo ficou conhecido como modelo do elétron livre, exemplificado na **Fig. 1**. (PÉREZ, 2000; ALCACÉR, 2013)

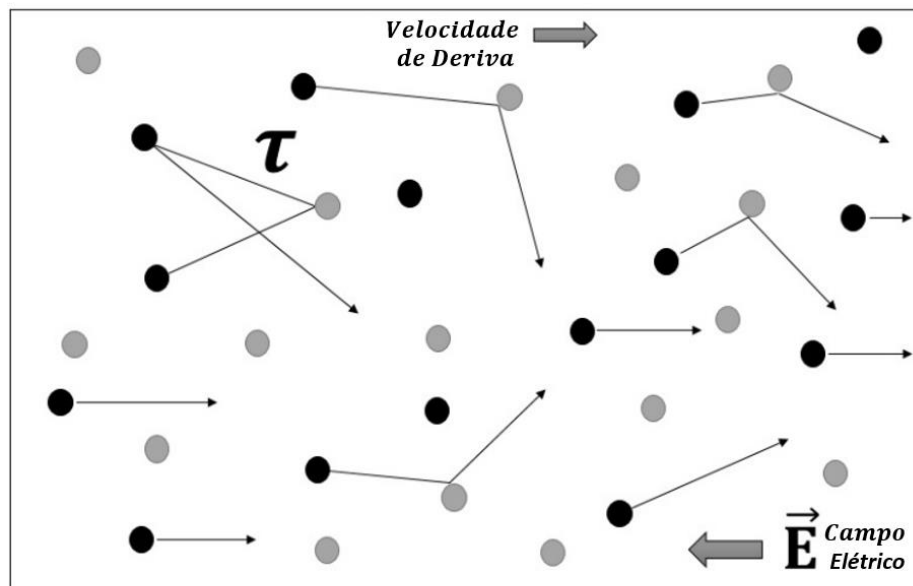


Figura 1 – Trajetória dos elétrons de condução (bolinhas pretas) colidindo com os íons fixos da rede, sob ação de um campo elétrico \vec{E} , de acordo com o modelo de Drude. Também é representado o tempo médio entre as colisões, τ .

Drude prediz que, quando os átomos dos elementos metálicos se unem para formar o metal, os elétrons fracamente ligados ao átomo, desligam-se e passam a se movimentar livremente através do metal. O metal é visualizado como um arranjo tridimensional de íons fixos e um grande número de elétrons livres, como um gás de elétrons. (PÉREZ, 2000)

Neste modelo foi aplicado a teoria cinética dos gases com algumas modificações. A utilização da teoria cinética dos gases para explicar propriedades eletrônicas dos sólidos foi razoável, visto que esta foi a primeira teoria microscópica da matéria a ter sucesso (PÉREZ, 2000).

As considerações básicas, nas quais fundamenta-se o modelo de Drude, são as seguintes (PÉREZ, 2000):

- 1- Entre uma colisão e outra, as forças de interação entre o elétron-elétron e o elétron-íon são desconsideradas. Então, o elétron move-se livremente no interior do metal.
- 2- As colisões ocorrem apenas entre o elétron e o íon da rede. Nessa colisão, há uma alteração abrupta da velocidade do elétron.
- 3- O elétron colide aleatoriamente contra um íon em um dado instante, tendo viajado um tempo médio τ até sua próxima colisão.

- 4- O equilíbrio térmico do sistema é mantido por meio das colisões de elétrons com os íons. O equilíbrio é mantido da seguinte forma: imediatamente após cada colisão, o elétron movimenta-se em direção aleatória com uma velocidade que não tem relação nenhuma com a velocidade antes do choque, mas o módulo é apropriado à temperatura do lugar onde ocorreu a colisão. Quanto mais alta for a temperatura do lugar onde se dá a colisão, mais rapidamente se movimentará o elétron após o choque.

Usando a relação entre a energia cinética média e a temperatura, pode-se encontrar a velocidade média dos elétrons da rede. Assim (PÉREZ, 2000)

$$\frac{3}{2}k_B T = \frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle. \quad (4.1)$$

Além disso, esse modelo fornece uma explicação plausível para a lei de Wiedemann e Franz, onde relaciona a condutividade térmica e a condutividade elétrica por meio da expressão (PÉREZ, 2000)

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T. \quad (4.2)$$

4.2. CONDUTIVIDADE ELÉTRICA

Ao aplicar um campo elétrico sobre um condutor os elétrons irão se mover com uma velocidade média aproximadamente constante, chamada de velocidade de deriva v_d . Dado um fio com seção transversal A e comprimento L (**Fig. 2**) com n elétrons por unidade de volume, então o número de elétrons no condutor será $N = nAL$. Assim, pode-se obter que (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1984)

$$J = nev_d, \quad (4.3)$$

onde e é a carga elétrica elementar e J é o módulo do vetor densidade superficial de corrente elétrica, que se relaciona com a corrente elétrica I por $I = \oint_S \vec{J} \cdot d\vec{S}$.

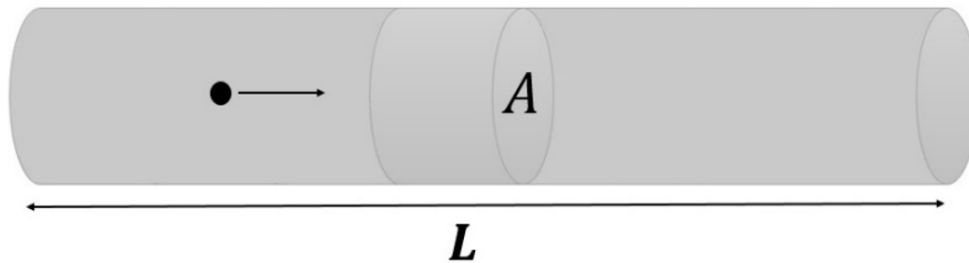


Figura 2 - Elétron se movendo em um fio condutor.

Admitindo que, por ação de um campo elétrico, os elétrons se desloquem em um meio onde há colisões com os íons. Logo, o módulo da aceleração do elétron será (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1984)

$$a = \frac{eE}{m}, \quad (4.4)$$

onde E é o campo elétrico aplicado ao condutor e m é a massa do elétron. Haverá um tempo médio entre as colisões, de modo que pode-se relacionar com a velocidade de deriva da seguinte maneira (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1984)

$$v_d = a\tau = \frac{eE}{m}\tau. \quad (4.5)$$

Como o tempo τ entre as colisões é muito pequeno, essa velocidade é aproximadamente constante. Mas usando a equação (4.5) em (4.3), tem-se

$$J = \frac{ne^2\tau}{m}E. \quad (4.6)$$

Assim, define-se $\vec{j} = \sigma\vec{E}$, onde a constante de proporcionalidade é denominada de condutividade elétrica; a relação inversa é a resistividade elétrica ρ . Portanto,

chega-se à conclusão que a condutividade elétrica pode ser escrita como (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 1984)

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (4.7)$$

4.3 CONDUTÂNCIA ELÉTRICA

O transporte de corrente elétrica pode ser descrito pela Lei de Ohm, que relaciona a diferença de potencial ΔV aplicada entre os extremos de um condutor, com a corrente e a resistência elétrica, por meio de $R = \Delta V/I$. A resistência também pode ser definida através de parâmetros geométricos do sistema, $R = \rho \frac{L}{A}$, sendo ρ a resistividade, característica do material, A é a seção transversal do fio e L o seu comprimento.

O inverso da resistência elétrica é a condutância elétrica. Para um fio metálico de seção transversal uniforme, com área A , e comprimento L , como o apresentado na **Fig. 2**, intuitivamente espera-se que a condutância cresça com o aumento da seção transversal do condutor e decresça com o aumento do seu comprimento. Estas relações são verificadas experimentalmente e definem uma grandeza física chamada de condutância, que pode ser expressa matematicamente da seguinte maneira (RODRIGUES, 1999)

$$G \equiv \frac{I}{\Delta V} = \frac{\sigma A}{L}, \quad (4.8)$$

com $\sigma = 1/\rho$. Então, nota-se a dependência direta da condutância com propriedades geométricas do condutor, como área e comprimento.

Microscopicamente⁴, a Lei de Ohm (que caracteriza a resistência elétrica) tem origem nas colisões dos elétrons que transportam carga no condutor com os íons da

⁴ O embasamento microscópico da Lei de Ohm só foi dado alguns anos depois, a partir do modelo de Drude.

rede, no caso do modelo de Drude; ou no espalhamento sofrido por esses elétrons, no caso de modelos quânticos de condução eletrônica (RODRIGUES, 1999).

A Lei de Ohm (que define a condutância elétrica) funciona muito bem para fios macroscópicos, mas o que esperar quando suas dimensões forem reduzidas para valores da ordem de nanômetro? Será que a condutância ainda irá variar continuamente? É exatamente isto que será abordado nas seções seguintes. Mas, para as abordagens quânticas do fenômeno da condução eletrônica, é necessário o estudo de modelos quânticos, como o modelo de Sommerfeld, apresentado a seguir.

4.4 MODELO DE SOMMERFELD

Lorentz trabalhou no refinamento do modelo de Drude, mas ainda assim o modelo era caracterizado pela presença de elétrons livres como esferas rígidas idênticas. No entanto, esse tratamento não é o mais apropriado. (PÉREZ, 2000; FIGUEIREDO, 2002-2006)

O modelo que explica melhor a condução elétrica é o de Sommerfeld, onde agora é abordado utilizando a física quântica. As principais diferenças do modelo quântico em relação ao modelo clássico, é que agora passamos a considerar particularidades estatísticas dos objetos quânticos, em particular dos férmions, classe de partículas que engloba os elétrons. Os férmions são partículas que apresentam spin semi-inteiro e que satisfazem o princípio da exclusão de Pauli. A teoria de Sommerfeld também possui aproximações, mas explica bem a condução elétrica utilizando um pouco mais de rigor (FIGUEIREDO, 2002-2006; BARRETO, 2015).

Por questões de simplicidade, é analisado o comportamento no estado fundamental (i.e. $T = 0$)⁵ do gás de elétrons. Mesmo à temperatura ambiente, muitas das propriedades eletrônicas de um metal quase não diferem de seus valores a $T = 0$. (ASHCROFT, 2011)

São calculadas as propriedades do estado fundamental de N elétrons confinados a um volume V . Adotando o modelo do elétron não interagente (elétron livre). Pode-se determinar o estado fundamental do sistema de N elétrons,

⁵ É adotada, ao longo do trabalho, a unidade de temperatura em Kelvin.

determinado-se inicialmente os níveis de energia de um único elétron no volume V , e, em seguida, preenchendo-se estes níveis de acordo com o princípio da exclusão de Pauli. (ASHCROFT, 2011)

Um único elétron pode ser descrito por uma função de onda $\psi(\vec{r})$ e a especificação de qual das duas possíveis orientações possui seu spin. Como o elétron considerado não sofre nenhuma interação, a função de onda associada ao nível de energia E satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (4.9)$$

O próximo passo é a escolha das condições de contorno que a equação (4.9) deve satisfazer. Uma das possibilidades é impor $\psi(\vec{r}) = 0$ nas extremidades de um cubo de volume V . Porém, isto parece insatisfatório, pois leva a soluções de ondas estacionárias, o que no caso da condução elétrica não parece muito interessante⁶. Uma escolha mais adequada ao problema em questão é imaginar cada face do cubo unindo-se a face oposta, de forma que o elétron que chega à superfície não seja por ela refletido. No entanto, topologicamente, é praticamente impossível visualizar isso. Mas, em um caso unidimensional, pode-se imaginar que liga-se as extremidades de um fio de comprimento L , formando uma circunferência. Assim, tem-se $\psi(x + L) = \psi(x)$, e a generalização ao cubo tridimensional é dada por (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006)

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z + L) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (4.10)$$

A equação (4.10) é conhecida como condição de contorno de *Born-Von Karman*⁷ (ou condição de contorno periódica). (ASHCROFT, 2011)

⁶ A análise aqui feita está considerando que o elétron possui apenas energia cinética, não havendo qualquer potencial aplicado ao mesmo.

⁷ Caso impuséssemos condições com ψ se anulando nas faces do cubo, como no caso do potencial infinito, os autoestados seriam estacionários, e \vec{j} se anularia (ASHCROFT, 2011). Além disso, pode-se aplicar essa condição de contorno, pois em geral estudamos sistemas muito grandes, em comparação

Pode-se verificar que uma solução da equação (4.9), ainda sem considerar as condições de contorno é (ASHCROFT, 2011)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (4.11)$$

onde k pode ser positivo ou negativo, dependendo em que sentido o elétron se move. A energia desse elétron será (ASHCROFT, 2011)

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}. \quad (4.12)$$

A normalização da função de onda da equação (4.11) foi obtida tornando a probabilidade de encontrar o elétron no volume V igual a um, ou seja:

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1. \quad (4.13)$$

Na mecânica quântica associamos para qualquer observável A (como por exemplo, a posição, o momento linear, o momento angular, a energia, etc.) um operador correspondente escrito como \hat{A} . Um exemplo de um operador simples e importante é o operador momento linear, dado por $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$. Assim, ao aplicá-lo na função de onda quântica, tem-se a instrução de derivá-la com relação as suas coordenadas e, posteriormente, multiplicá-la por \hbar/i .

O significado do vetor de onda \vec{k} é dado ao aplicar o operador momento na função de onda da equação (4.11)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \hbar \vec{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (4.14)$$

Assim, $\psi(\vec{r})$ é um autoestado (pois a equação 4.14 é uma equação de autovalores e autovetores/autoestados) do operador momento com autovalor $\vec{p} = \hbar \vec{k}$,

com as dimensões quânticas, o que faz os efeitos que as bordas exercem naquilo que está no interior desses sistemas serem irrelevantes.

com velocidade $\vec{v} = \hbar \vec{k}/m$. Em vista disso, a energia pode ser escrita na forma clássica como sendo (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006)

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2. \quad (4.15)$$

A primeira condição de contorno da equação (4.10) diz que

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z(z+L))} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}; \quad \Rightarrow \quad e^{ik_z L} = 1. \quad (4.16)$$

Isto impõe a \vec{k} a condição de que somente certos valores discretos sejam permitidos. Pode-se usar relações análogas para as direções y e z . Então,

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1, \quad (4.17)$$

como $e^w = 1$ somente se $w = 2\pi i n$, onde n um número inteiro⁸, as componentes do vetor de onda devem ser da forma

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}; k_y = \frac{2\pi n_y}{L}; k_z = \frac{2\pi n_z}{L}. \quad (4.18)$$

Como foi considerado que os elétrons são livres, isto é, não interagentes, pode-se construir o estado fundamental de N elétrons, colocando-se elétrons nos níveis permitidos de energia obtidos a partir de (4.15) e respeitando o princípio da exclusão de Pauli. (ASHCROFT, 2011)

Macroscopicamente, o número de elétrons com que lida-se em um metal é muito grande, da ordem de 10^{23} por cm^3 . Logo, a densidade de pontos k permitidos é grande o suficiente de modo que os níveis ocupados podem ser representados como pontos no interior de uma esfera⁹ no espaço dos vetores de onda com raio k_F , como mostra a **Fig. 3**. Esta esfera é conhecida como esfera de Fermi. Sua superfície, onde

⁸ A palavra inteiro se refere a números positivos, zero, ou negativo.

⁹ Se ela não fosse uma esfera, não seria o estado fundamental, já que poder-se-ia, então, construir um estado de menor energia movimentando os elétrons em níveis mais distantes de $k = 0$ para os níveis não ocupados próximos a origem. (ASHCROFT, 2011)

estão localizados os elétrons de maior energia é a superfície de Fermi, e os elétrons aí localizados têm a energia de Fermi (E_F) e vetor de onda com módulo igual a \vec{k}_F (vetor de onda de Fermi). Ou seja, a energia de Fermi é a energia do nível mais alto ocupado no estado fundamental (estado de menor energia do sistema) de um sistema de N elétrons (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006; OLIVEIRA; JESUS, 2005).

Portanto, em $T = 0$, o sistema ocupará certos níveis de energia, limitados pela superfície de Fermi com energia de Fermi E_F .

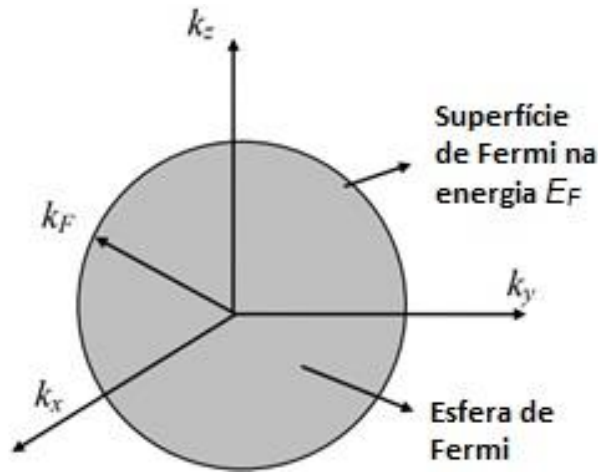


Figura 3 - A região cinza (esfera de Fermi) representa os vetores de onda ocupados no gás de elétrons livres. Os elétrons mais energéticos, localizados na superfícies de Fermi, têm energia $E_F = \hbar k_F^2/2m$ e vetor de onda de módulo k_F .

De acordo com equação (4.18), existe um vetor de onda permitido, ou seja, um conjunto de valores dos números quânticos k_x , k_y , k_z para cada elemento de volume $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ do espaço k (que caracteriza um orbital). Assim para acomodar N elétrons (o que representa uma densidade eletrônica $n = N/V$) em uma esfera de volume $V = \frac{4}{3}\pi k_F^3$ o número total de orbitais deve ser (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006)

$$N = 2 \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3 k_F^3}{3\pi^2} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3, \quad (4.19)$$

onde o fator 2 aparece porque existem dois valores permitidos para o número quântico de spin ($\pm\hbar/2$), para cada valor permitido de \vec{k} . Então, de acordo com a equação (4.19), temos:

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (4.20)$$

um valor que depende apenas da concentração de partículas.

O estado fundamental do gás de férmions, ou seja, o seu estado de menor energia, é obtido distribuindo-se N elétrons nos diversos estados relativos a k , em ordem crescente de energia, obedecendo-se ao princípio da exclusão. Por exemplo, o estado de menor energia é o ponto $k = 0$, onde pode-se colocar dois elétrons. Depois tem-se 6 estados com a mesma energia E_1 , correspondendo a $(n_x, n_y, n_z) = (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$ onde pode-se colocar 12 elétrons, e assim sucessivamente. (OLIVEIRA; JESUS, 2005)

A partir da magnitude do vetor de onda de Fermi k_F , a velocidade, a energia e a temperatura de Fermi podem escritas como (ASHCROFT, 2011)

$$\begin{aligned} v_F &= \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \\ E_F &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \\ T_F &= \frac{E_F}{K_B}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Abaixo segue o valor desses parâmetros para alguns metais (ASHCROFT, 2011; KITTEL, 2006; OLIVEIRA; JESUS, 2005; LEMELL et al., 2009)

Elemento	E_F (eV)	T_F ($10^4 K$)	K_F ($10^8 cm^{-1}$)	v_F ($10^8 cm/s$)
Li	4,74	5,51	1,12	1,29
Na	3,24	3,77	0,92	1,07
Au	5,53	6,42	1,21	1,40
Ag	5,49	6,38	1,20	1,39
Cu	7,00	8,16	1,36	1,57
W	9,75	11,31	1,60	1,85

Tabela 1 - Energias de Fermi, temperaturas de Fermi, vetores de onda de Fermi e velocidades de Fermi para alguns metais à temperatura ambiente.

É interessante destacar que essa temperatura não é a temperatura do gás ideal, mas sim um parâmetro com dimensão de temperatura que representa a energia (cinética) dos elétrons mais energéticos do sistema a $T = 0$.

Ainda pode-se obter a energia total do gás, ou energia interna, do estado fundamental do gás de férmions, somando as energias possíveis de 0 a k_F , obtendo (ASHCROFT, 2011; OLIVEIRA; JESUS, 2005)

$$\mathcal{U} = \frac{3}{5} N E_F. \quad (4.22)$$

Então, em $T = 0$ a energia do gás é uma fração da energia de Fermi. Nota-se o contraste com o gás ideal clássico, para o qual $\mathcal{U} = \frac{3}{2} N K_B T$ e, obviamente, $\mathcal{U} = 0$ para $T = 0$. Isto é, classicamente todos os elétrons estariam parados a $T = 0$, mas não quanticamente¹⁰ (estariam todos em um mesmo estado, totalmente degenerado). (ASHCROFT, 2011; OLIVEIRA; JESUS, 2005)

Além disso, é possível mostrar um resultado interessante, que é o fato da pressão exercida por um gás de férmions a $T = 0$ ser diferente de zero. (SALINAS, 2005)

4.5 DISTRIBUIÇÃO DE FERMÍ-DIRAC

¹⁰ Isso é válido apenas para férmions.

Foi apresentado no modelo de Sommerfeld que os elétrons se distribuem de acordo com o princípio da exclusão de Pauli: 1 elétron com dado spin por estado, de um mínimo de energia $E = 0$ até $E = E_F$, para a análise feita à $T = 0K$. Tal distribuição eletrônica é particularmente simples, e pode ser representada por uma função $P(E)$ cuja a forma é mostrada na **Fig. 4**. Pode-se considerar $P(E)$ como a probabilidade de que um dado estado com energia E esteja ocupado. (OLIVEIRA; JESUS, 2005)

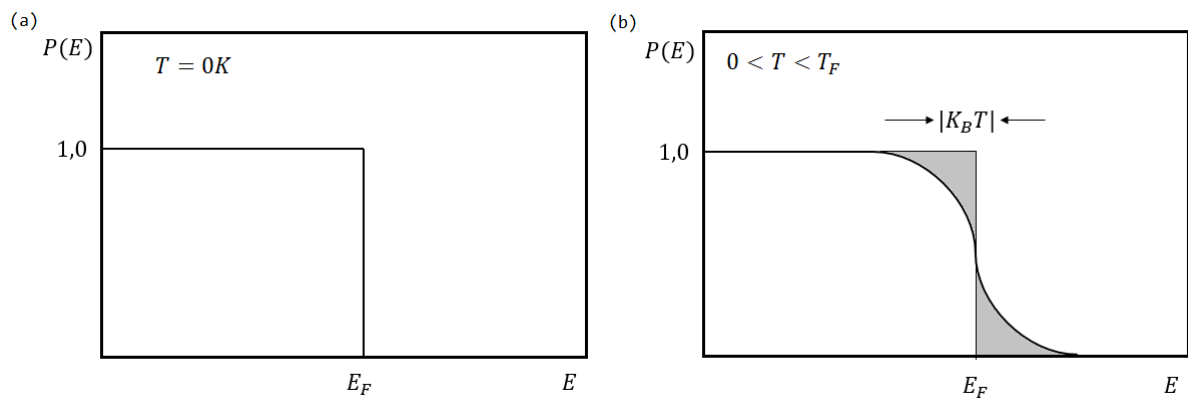


Figura 4 – (a) Função de distribuição de Fermi-Dirac para $T = 0K$. (b) Função de distribuição de Fermi-Dirac para $0 < T < T_F$.

Nota-se da **Fig. 4(b)** que somente elétrons que estejam com energia da ordem de $K_B T$ em torno de E_F poderão ser termicamente promovidos para níveis mais altos de energia. Isso significa dizer que a **Fig. 4(b)** só será modificada significativamente em torno de E_F . A Física Estatística nos mostra que a função distribuição $P(E)$ é dada por (OLIVEIRA; JESUS, 2005)

$$P(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu(T))/K_B T} + 1}, \quad (4.23)$$

onde $\mu(T)$ é o potencial químico. Para $T = 0K$, temos $\mu(T = 0) = E_F$, e $P(E)$ modela a curva da **Fig. 4(a)**. Pode-se mostrar que para T da ordem da temperatura ambiente, $\mu(T)$ é aproximadamente igual a energia de Fermi, diferindo da mesma em apenas cerca de 0,01% (ALCACÉR, 2013). Portanto, em geral, para os estudos da condução

elétrica em metais é razoável estudar apenas o comportamento dos elétrons à $T = 0K$.

4.6 CONDUTIVIDADE ELÉTRICA VIA MODELO DE SOMMERFELD

Para compreender-se o mecanismo da corrente elétrica em metais, serão combinados resultados clássicos com quânticos. Pode-se relacionar o momento de um elétron livre ao vetor de onda por meio da equação $m\vec{v} = \hbar\vec{k}$. Na presença de um campo elétrico \vec{E} a força \vec{F} exercida sobre o elétron é $-e\vec{E}$ e, portanto, de acordo com a segunda Lei de Newton, tem-se (KITTEL, 2006)

$$\vec{F} = m d\vec{v}/dt = \hbar d\vec{k}/dt = -e\vec{E}. \quad (4.24)$$

Na presença de um campo elétrico constante \vec{E} e considerando que não há interferência de outra natureza, a esfera de Fermi (**Fig. 3**) move-se de maneira uniforme no espaço k . Rearranjando a equação (4.24) e integrando, obtém-se (KITTEL, 2006)

$$\vec{k}(t) - \vec{k}(t = 0) = -e\vec{E}t/\hbar. \quad (4.25)$$

Assim, a esfera será deslocada no sentido oposto ao campo elétrico aplicado, **Fig. 5**, de modo que (KITTEL, 2006)

$$\delta\vec{k} = -e\vec{E}t/\hbar. \quad (4.26)$$

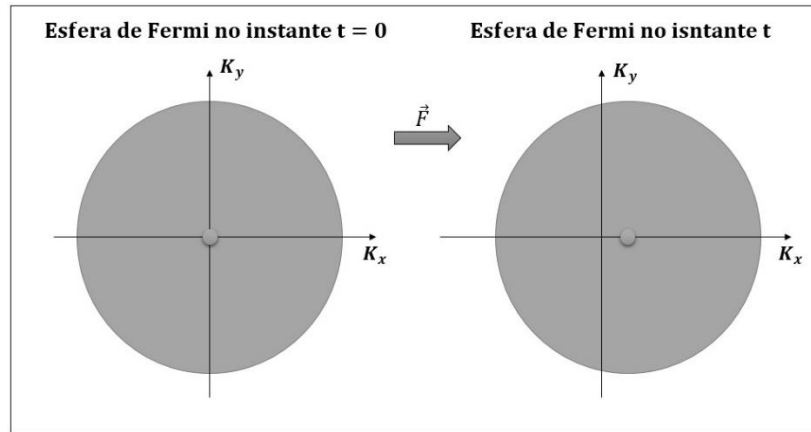


Figura 5 - A esfera de Fermi contém os orbitais ocupados do espaço \vec{k} no estado fundamental de um gás de elétrons. O momento linear total é zero, pois para cada estado \vec{k} ocupado existe um correspondente $-\vec{k}$ também ocupado, o que torna $\sum \vec{k} = 0$ e consequentemente uma corrente elétrica nula. Sob a influência de uma força \vec{F} agindo durante um intervalo de tempo t , os vetores de onda de todos os orbitais aumentam de $\delta\vec{k} = \vec{F}t/\hbar$. Isto equivale a deslocar de $\delta\vec{k}$ toda a esfera de Fermi. O momento linear total dos elétrons passa a ser $N\hbar\delta\vec{k}$.

Por causa do espalhamento das ondas devido as impurezas, imperfeições da rede cristalina e fônons, a esfera será mantida num estado estacionário no campo elétrico (o cálculo exato mostra que, se o cristal for perfeitamente ordenado, $\tau = \infty$, isto é, não há espalhamento das ondas, a não ser nas condições mencionadas). Se o tempo entre um espalhamento do elétron e outro é τ , o deslocamento da esfera de Fermi é dado pela equação (4.26). A velocidade correspondente é $\vec{v} = \vec{v}_F = \delta\vec{k}/m = -e\vec{E}\tau/m$ (o deslocamento é o mesmo para todos os elétrons, inclusive para os da superfície de Fermi). Se na presença de um campo elétrico constante \vec{E} existem n elétrons de carga $q = -e$ por unidade de volume, a densidade de corrente elétrica é dada por (KITTEL, 2006)

$$\vec{j} = nq\vec{v}_F = ne^2\tau\vec{E}/m. \quad (4.27)$$

Além disso, pode-se também obter uma expressão mais exata para a condutividade elétrica, que se relaciona diretamente com condutância elétrica.

Mesmo sendo um modelo semi-clássico, conseguiu explicar quase todas as propriedades básicas dos metais, incluindo a variação linear do calor específico a volume constante com a temperatura. Em 1928, Bloch usou a mecânica quântica de

Heisenberg-Born-Jordan-Schrodinger para entender os metais, que possibilitou a distinção entre condutores, isolantes e semicondutores. (SALINAS, 2005; BASSALO, 1993)

4.7 CORRENTES QUÂNTICAS

Esta seção se iniciará discutindo-se conceitos relacionados a probabilidades. Quanticamente, a corrente de probabilidade \mathcal{J} é definida como (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\mathcal{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} - \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right). \quad (4.28)$$

Pode-se mostrar que a taxa temporal com que a probabilidade varia é (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = \mathcal{J}(a, t) - \mathcal{J}(b, t). \quad (4.29)$$

Que descreve a variação da probabilidade no intervalo $a < x < b$, no instante de tempo t , onde a probabilidade nesse intervalo é obtida da seguinte maneira (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$P_{ab} = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (4.30)$$

Supondo uma partícula de carga q , quanticamente pode-se definir a carga esperada em um intervalo (a, b) no instante de tempo t , como (BROCKS, 2005)

$$Q_{ab}(t) = qP_{ab}(t). \quad (4.31)$$

onde $Q_{ab}(t)$ pode ser entendido como a quantidade de carga elétrica que se encontra no intervalo (a, b) , no instante de tempo t . Pode-se entender esta relação por meio de um exemplo: Supondo que haja um feixe de partículas que emita 10.000 partículas com carga q por segundo. Observa-se quantas partículas, num total de 10.000, está no intervalo (a, b) , no instante $t = 1s$. Se desse conjunto de partículas forem observadas apenas 100 partículas no intervalo (a, b) em $t = 1s$, então $Q_{ab} = q \frac{100}{10.000} = 0,01q$. Isto não quer dizer que em cada observação foi encontrada uma partícula de carga $0,01q$, mas que de total de 10.000 partículas isto equivale a $0,01q$ de carga no intervalo (a, b) no tempo $t = 1s$. Esse exemplo também poderia ser feito lançando uma partícula 10.000 vezes, ao invés de lançar um feixe com 10.000 partículas apenas uma vez. Além disso, como J tem unidade de probabilidade por segundo, então pode-se definir a corrente elétrica como (BROCKS, 2005)

$$I(x, t) = qJ(x, t), \quad (4.32)$$

ou seja, se a corrente de probabilidade aumentar em uma região, então quer dizer que há uma maior probabilidade de encontrar a partícula em um intervalo (a, b) em certo instante t ; sendo esta maior, então a carga nesta região também será maior e, por conseguinte, a corrente elétrica aumenta. A taxa de variação temporal é obtida tomando a diferença da corrente elétrica que entra menos a corrente elétrica que sai, ou seja (BROCKS, 2005)

$$\frac{dQ_{ab}(t)}{dt} = I(a, t) - I(b, t). \quad (4.33)$$

Considere agora o caso de estados estacionários. Um estado estacionário é descrito por (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}, \quad (4.34)$$

onde a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $a < x < b$ não varia com o tempo, isto é (GRIFFITHS, 2011)

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = 0. \quad (4.35)$$

E ainda pode-se mostrar também que $\mathcal{J}(x, t) = \mathcal{J} = \text{constante}$. Então, a corrente de probabilidade independe da posição e do tempo. Como exemplo, considera-se o caso da partícula livre unidimensional se movendo no sentido x positivo

$$\psi(x) = Ae^{ikx}. \quad (4.36)$$

No entanto a normalização desta função leva a uma divergência. Mas ela pode servir de base para uma combinação linear, que vai caracterizar um pacote de onda, que é a maneira mais adequada de descrever uma partícula livre. Entretanto, no caso em questão (da onda plana), a única maneira de satisfazer a condição de normalização seria fazer $A = 0$. Esta dificuldade surge porque a situação de uma partícula livre em uma região infinita é de fato não-física. Experimentos reais são sempre realizados em locais com extensão finita. Em sistemas unidimensionais, isto significa impor que a função de onda deva ser normalizada em uma “caixa” de comprimento L . Assim, a probabilidade de encontrar uma partícula no intervalo (a, b) pode ser obtida usando a equação (4.30)

$$P_{ab} = |A|^2(b - a) = \rho(b - a), \quad (4.37)$$

onde $|A|^2 = \rho$ é a densidade de probabilidade, que pode ser interpretada como a *probabilidade por unidade de comprimento*, ou, em outras palavras, representa a probabilidade de encontrar a partícula em certo intervalo por unidade de comprimento. Partindo da definição de corrente de probabilidade¹¹, obtém-se

$$\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m} \rho. \quad (4.38)$$

¹¹ A corrente de probabilidade para uma partícula livre ainda é bem definida quando se usa ondas planas. Logo, pode-se utilizá-las para o estudo dos coeficientes de transmissão e reflexão. (BROCKS, 2005)

Usando a relação de *de Broglie*, o momento pode ser escrito como $p = \hbar k$, e assim a velocidade da partícula pode ser expressa por (TOLLEY, 2013; BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$v = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}. \quad (4.39)$$

Então, a equação (4.38) se torna

$$\mathcal{J} = v\rho, \quad (4.40)$$

Logo, a corrente elétrica pode ser expressa como (BROCKS, 2005)

$$I = q\mathcal{J} = qv\rho, \quad (4.41)$$

que é a definição usual de corrente elétrica. A diferença está no significado da densidade ρ . Enquanto usualmente esta é definida como número de partículas por unidade de comprimento; quanticamente é definida como uma densidade de probabilidade, isto é, a probabilidade de encontrar a partícula em determinada região por unidade de comprimento. Para o caso de estados estacionários, a velocidade e a densidade são constantes, o que implica em uma corrente elétrica constante (BROCKS, 2005).

Para um caso mais geral de uma partícula livre, que é quando há reflexões da função de onda, tem-se que a função de onda dessa partícula é (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (4.42)$$

sendo A e B constantes determinadas pelas condições de contorno do problema. A partir da equação (4.28) e usando a função de onda da equação (4.42), a corrente de probabilidade \mathcal{J} se torna (BROCKS, 2005)

$$\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2, \quad (4.43)$$

que é interpretado como uma corrente de probabilidade para a esquerda menos uma corrente de probabilidade para a direita, onde A representa a onda incidente e B representa a onda refletida, **Fig. 6**. Assim, pode-se escrever esta corrente como (BROCKS, 2005)

$$J = J_{in} - J_R. \quad (4.44)$$

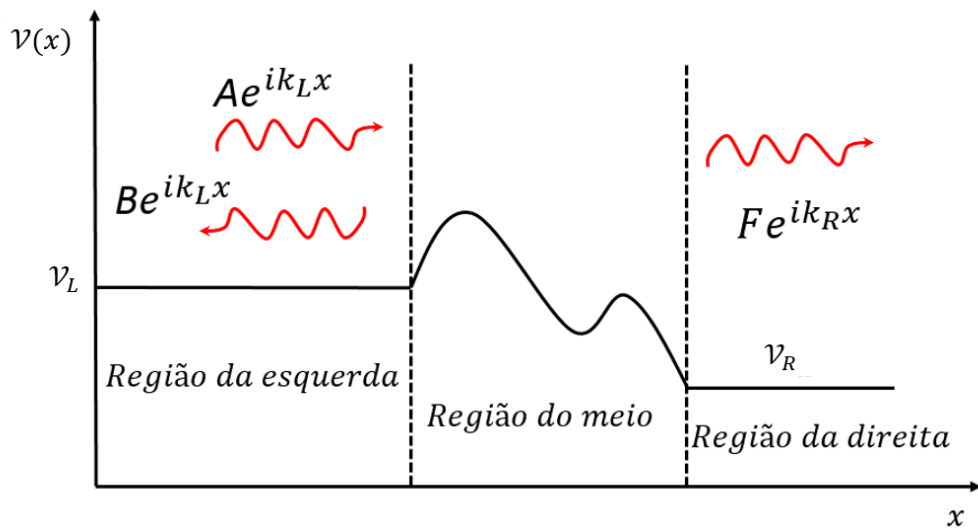


Figura 6 - Ilustração de um espalhamento unidimensional. No lado esquerdo há um potencial constante V_L . Na região do meio é onde ocorre o espalhamento da onda. Na região direita o potencial é novamente constante V_R . É mostrado as três ondas: no lado esquerdo a onda incidente, com amplitude A e a refletida, com amplitude B . Do lado direito a onda transmitida, com amplitude F .

O coeficiente de reflexão \mathcal{R} , que representa a probabilidade da onda incidente ser refletida, é expresso como (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\mathcal{R} = \frac{J_R}{J_{in}} = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (4.45)$$

Considerando o problema de espalhamento da **Fig. 6**. Na região da esquerda, assume-se o potencial¹² constante igual a V_L e na região direita assume-se o potencial

¹² Não confundir o potencial elétrico V com o volume V , nem tão pouco com a energia potencial $\mathcal{V} = -e\Delta V$, geralmente denominado apenas de potencial.

\mathcal{V}_R . Logo, a solução da região da esquerda é dada pela equação (4.42), com k substituído por k_L (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$k_L = \frac{\sqrt{2m(E - \mathcal{V}_L)}}{\hbar}. \quad (4.46)$$

Na região da direita, a solução para onda transmitida, supondo que não há novos espalhamentos, é dada por (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\psi(x) = F e^{ik_R x}, \quad \text{com } k_R = \frac{\sqrt{2m(E - \mathcal{V}_R)}}{\hbar}. \quad (4.47)$$

Agora, calcular-se-á as correntes de probabilidade relativas a cada onda. Primeiro, para a onda transmitida, tem-se (BROCKS, 2005)

$$\mathcal{J}_T = \frac{\hbar k_R}{m} |F|^2, \quad (4.48)$$

que é obtida a partir da equação (4.43) tomando $B = 0$ e substituindo A por F . Analogamente a definição do coeficiente de reflexão \mathcal{R} , pode-se definir também o coeficiente de transmissão \mathcal{T} como sendo a razão entre as correntes de probabilidade transmitida e incidente, isto é (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\mathcal{T} = \frac{\mathcal{J}_T}{\mathcal{J}_{in}} = \frac{v_R}{v_L} \frac{|F|^2}{|A|^2}, \quad (4.49)$$

onde foi feita a substituição de $\frac{\hbar k_R}{m}$ por v_R e $\frac{\hbar k_L}{m}$ por v_L , advinda da equação (4.39). A corrente de probabilidade de transmissão \mathcal{J}_T também pode ser escrita como (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$\mathcal{J}_T = \mathcal{J}_{in} - \mathcal{J}_R \Rightarrow \mathcal{J}_{in} = \mathcal{J}_R + \mathcal{J}_T. \quad (4.50)$$

Esta equação representa a conservação da corrente de probabilidade. Dividindo ambos os lados por J_{in} , obtém-se

$$1 = \mathcal{R} + \mathcal{T}. \quad (4.51)$$

4.8 CONDUTÂNCIA QUÂNTICA

4.8.1 Junção Túnel

Uma junção túnel é constituída por um metal com uma junção de um material isolante com espessura de poucos nanômetros, **Fig. 7**. A área que realiza estudos é chamada de Nanoeletrônica, que faz uso do comportamento das ondas de matéria para determinados fins. (BROCKS, 2005)

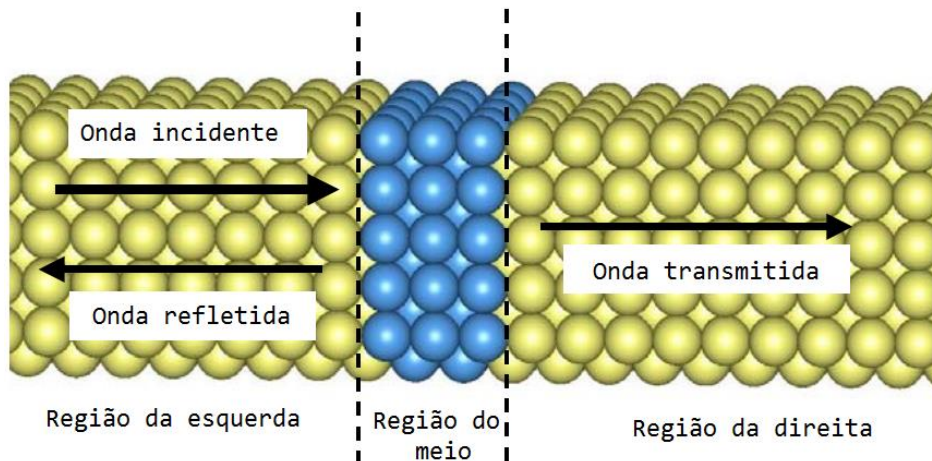


Figura 7 – Representação de uma junção túnel. As esferas amarelas representam o metal e as esferas azuis representam o isolante. As ondas de matéria no metal são refletidas e/ou transmitidas devido ao isolante. Fonte: (BROCKS, 2005, p. 6)

Pode-se montar um esquema simplificado para o estudo de uma junção de Túnel. Os elétrons de valência de um metal experimentam um potencial coulombiano relativamente fraco, de modo que pode-se aproximar o potencial do material como sendo constante (BROCKS, 2005). Esse potencial depende do tipo do átomo do qual o material é composto. Assim, representa-se o potencial na região do meio como uma

barreira de potencial constante e no metal também como constante, mas com valor diferente **Fig. 8**.

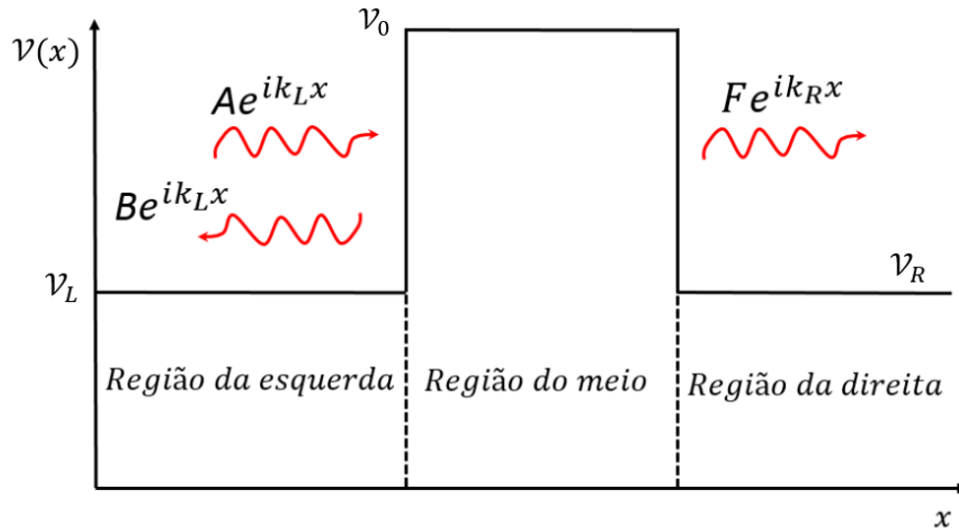


Figura 8 – Aproximação simplificada do potencial da junção Túnel. O potencial no metal da região da esquerda é mantido a um valor constante de V_L e o potencial do metal na região da direita é mantido a um valor constante de $V = V_R$. O potencial na região do meio é constante de valor V_0 . A onda incidente tem amplitude A , a onda refletida tem amplitude B e a onda transmitida tem amplitude F .

No entanto, se na região esquerda aplicar-se um potencial menor que V_L , então o potencial desta região irá diminuir por um valor $V_L - \Delta V$, **Fig. 9**.

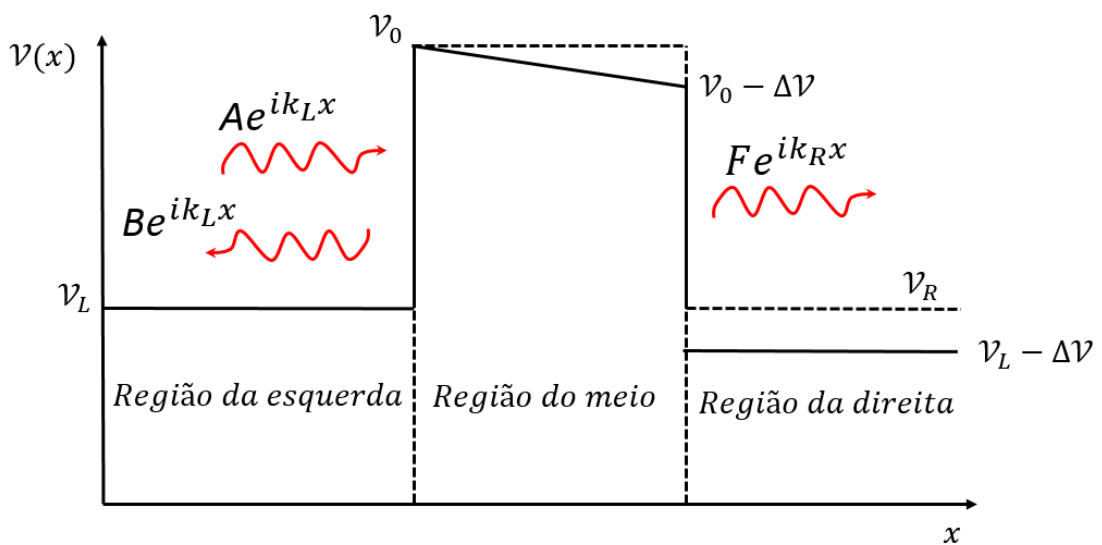


Figura 9 – Potencial da junção Túnel quando há uma diferença de potencial aplicada entre as regiões da esquerda e da direita.

Se a queda de tensão for muito pequena, isto é, $\Delta\mathcal{V} \ll \mathcal{V}_0 - \mathcal{V}_L$, então ainda será possível utilizar o coeficiente de transmissão calculado para a barreira quadrada (BROCKS, 2005).

4.8.2 A Fórmula de Landauer

De acordo com a equação (4.49), pode-se escrever a corrente de probabilidade transmitida como sendo

$$J_{\mathcal{T}} = J_{int}\mathcal{T}, \quad (4.52)$$

E usando a definição de corrente elétrica $I = qJ$, a equação (4.52) torna-se

$$I_{\mathcal{T}} = I_{in}\mathcal{T}, \quad (4.53)$$

onde a corrente elétrica incidente é $I_{in} = -ev\rho$, que advém da equação (4.41) com $q = -e$.

Supondo-se que a temperatura é $T = 0K$. Assim, para uma diferença de potencial ΔV , o produto $v\rho$ pode ser escrito como, (BROCKS, 2005)

$$v\rho = \frac{\Delta\mathcal{V}}{\pi\hbar} = -\frac{e\Delta V}{\pi\hbar}. \quad (4.54)$$

Que será demonstrado mais adiante. Logo, a corrente transmitida é (BROCKS, 2005)

$$I_{\mathcal{T}} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \Delta V \mathcal{T}. \quad (4.55)$$

Portanto, usando a definição de condutância elétrica, obtemos (BROCKS, 2005)

$$G = \frac{I_T}{\Delta V} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \mathcal{T} = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}, \quad (4.56)$$

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}. \quad (4.57)$$

Como \mathcal{T} é um parâmetro adimensional, o termo $2e^2/h$ tem dimensão de condutância, medida em Siemens. A equação (4.57) é conhecida como fórmula de Landauer. No problema em questão, essa equação só se torna válida para um sistema unidimensional e com baixa temperatura, mas que pode ser generalizada (BROCKS, 2005).

4.8.3 Derivação da Fórmula de Landauer em 1D

As regiões da esquerda e da direita de uma junção de túnel, **Fig. 7**, consistem de fios metálicos. Esses fios são considerados muito longos em comparação com a região central (que geralmente é muito pequena). Pode-se modelar o potencial de um fio metálico como ilustrado na **Fig. 10**.

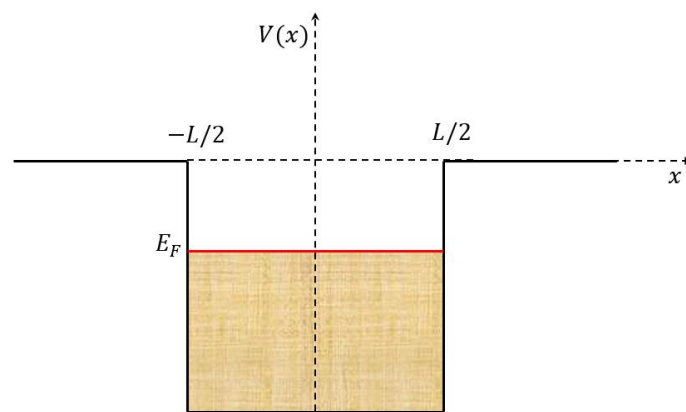


Figura 10 – Ilustração do potencial de um fio longo à $T = 0K$, onde as extremidades do fio são demarcadas por $-L/2$ e $L/2$. Como o fio é muito longo, o espectro de energia é aproximadamente contínuo. E_F marca o nível de energia de Fermi.

onde potencial é constante dentro dos fios e possui degraus nas extremidades do fio que mantém os elétrons ligados. Os níveis de energia desses elétrons são dados por¹³ (BROCKS, 2005)

$$E_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (4.58)$$

onde $k_n = \pi n/L$ é o número de onda e L o comprimento do fio.

O espaçamento entre os níveis $E_n - E_{n-1}$ é inversamente proporcional a L^2 . Isto é, se L é muito grande, o espaçamento entre os níveis de energia se aproxima de um contínuo.

As funções de onda são dadas por (BROCKS, 2005)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x = \frac{1}{i\sqrt{2L}} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}), \quad (4.59)$$

que corresponde a ondas estacionárias. No entanto, interessa-nos apenas o termo $\frac{1}{i\sqrt{2L}} e^{ik_n x}$ que pode ser representada como uma onda que caminha para a direita, bastando para isso acrescentar o termo $e^{-i\omega t}$. Assim, a probabilidade por unidade de comprimento é

$$\rho = \left| \frac{1}{i\sqrt{2L}} \right|^2 = \frac{1}{2L}. \quad (4.60)$$

Estudar-se-á a barreira de potencial representada na **Fig. 11**, que foi preenchida com estados ocupados pelos elétrons à $T = 0K$. Todo o desenvolvimento para chegar na fórmula de Landauer da maneira que será trabalhada mais adiante, é válido apenas quando o comprimento da constrição é menor que o livre caminho médio do elétron, o que implica em dizer que há conservação de energia quando o

¹³ Que é a energia de um poço de potencial infinito. Podemos utilizar esta expressão pois um poço finito muito largo e profundo possui, com muita boa aproximação, os mesmos níveis de energia do poço infinito. (BROCKS, 2005)

elétron sai da região da esquerda para a região da direita por meio da constrição. Ou seja, se o elétron da esquerda possuir, por exemplo, 5eV de energia, então o mesmo ocupará um estado na região da direita para esta energia específica, não podendo se alocar em outro estado. Caso fosse considerado dissipação de energia ao longo da constrição, deveria ser usado, como modelo teórico, múltiplas barreiras de potencial.

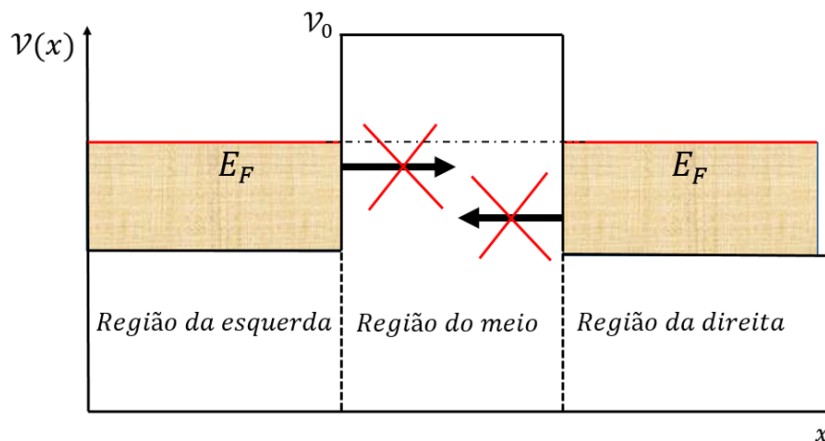


Figura 11 – Potencial da junção Túnel à $T = 0K$ com os estados preenchidos até o nível de Fermi. Como os elétrons estão “livres” para se movimentar dentro do metal, estes níveis foram preenchidos acima da linha que representa o potencial. Além disso, estamos considerando a situação com $T = 0K$, o gás de elétron (o metal) possui estados completamente preenchidos, impossibilitando a passagem de elétrons de um lado para o outro. O princípio da exclusão limita a quantidade em apenas dois elétrons por estado.

No entanto, ao aplicar uma diferença de energia potencial $\Delta V = -e\Delta V$, haverá um desbalanceamento na energia. A diferença de potencial faz com que a energia da região direita seja reduzida como um todo, surgindo agora estados que podem ser ocupados por elétrons da região da esquerda, **Fig. 12**.

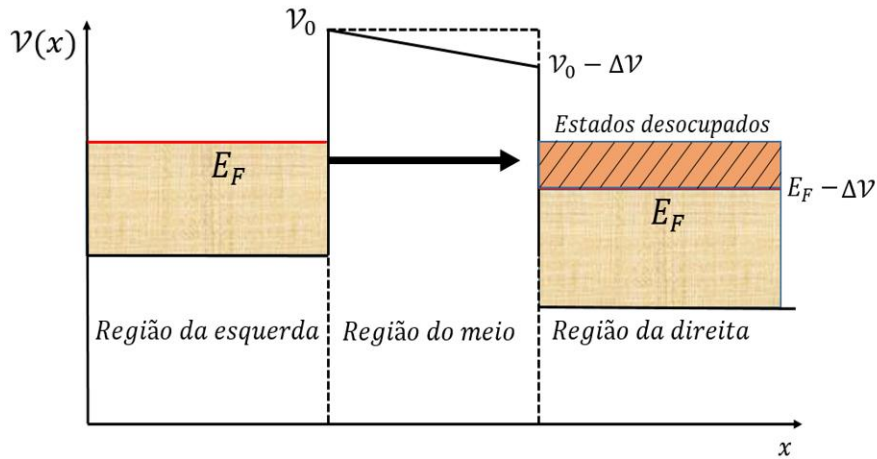


Figura 12 – Junção Túnel sob aplicação de uma diferença de potencial. Note que agora há estados desocupados, de modo que os elétrons da região esquerda podem agora atravessar a barreira e ocupar esses estados.

Do lado esquerdo, **Fig. 12**, apenas elétrons com energia $E_F - \Delta V < E < E_F$ podem atravessar a barreira para ocupar os níveis. Então, a corrente incidente terá contribuição para todos os elétrons com energia nessa faixa. Além disso, deve-se levar em consideração que em cada nível de energia n há dois elétrons com spins opostos. Então deve-se multiplicar o valor da corrente elétrica (expressa na equação 4.41) por um fator 2. Logo, somando sobre todos os estados disponíveis, tem-se (BROCKS, 2005)

$$I_{in} = -2e\rho \sum_{E_F - \Delta V < E_n < E_F} v_n. \quad (4.61)$$

Pode-se usar um truque para transformar o somatório em uma integral, da seguinte maneira (BROCKS, 2005)

$$\sum v_n = \frac{L}{\pi} \sum v_n \frac{L}{\pi}. \quad (4.62)$$

Como $k_n = \pi n/L$, então $\Delta k = k_n - k_{n-1} = \frac{\pi}{L}$. Logo, a equação (4.62) se torna

$$\sum v_n = \frac{L}{\pi} \sum v_n \Delta k, \quad (4.63)$$

e como L é grande,

$$\sum v_n \approx \frac{L}{\pi} \int v dk. \quad (4.64)$$

Os limites de integração devem corresponder a $E_F - \Delta\mathcal{V}$ e E_F , para o limite inferior e superior, respectivamente. Pode-se transformar a integral da equação (4.64) de uma integração em dk para um integração em dE . Da equação (4.39) tem-se que

$$v = \frac{\hbar k}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2 k}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (4.65)$$

Logo, a integral da equação (4.64) pode ser expressa como (BROCKS, 2005)

$$\int_{E_F - \Delta\mathcal{V}}^{E_F} v dk = \int_{E_F - \Delta\mathcal{V}}^{E_F} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = \int_{E_F - \Delta\mathcal{V}}^{E_F} \frac{1}{\hbar} dE = \frac{1}{\hbar} [E_F - (E_F - \Delta\mathcal{V})] = \frac{1}{\hbar} \Delta\mathcal{V}, \quad (4.66)$$

$$\sum_{E_F - \Delta\mathcal{V} < E_n < E_F} v_n \approx \frac{L}{\pi} \left(\frac{1}{\hbar} \Delta\mathcal{V} \right). \quad (4.67)$$

Usando as informações da equação (4.67) e (4.60), então a equação (4.61) se torna

$$I_{in} = -2e\rho \sum_{E_F - \Delta\mathcal{V} < E_n < E_F} v_n \approx -2e \left(\frac{1}{2L} \right) \left(\frac{L}{\pi \hbar} \Delta\mathcal{V} \right) = -\frac{e\Delta\mathcal{V}}{\pi \hbar}. \quad (4.68)$$

Logo, a corrente elétrica na região da direita da **Fig. 12** (corrente transmitida) é dada por

$$I_{\mathcal{T}} = -\left(\frac{e\Delta\mathcal{V}}{\pi \hbar} \right) \mathcal{T} = -\frac{2e}{h} (-e\Delta V) \mathcal{T} = \frac{2e^2}{h} \Delta V \mathcal{T} = G\Delta V, \quad (Q.E.D) \quad (4.69)$$

onde \mathcal{T} é a probabilidade de transmissão para um elétron com energia E . Desta forma chegando-se a equação de Landauer.

4.8.4 Derivação da Fórmula de Landauer em 3D

Para construção da fórmula de Landauer em três dimensões, começar-se-á com uma generalização da **Fig. 8**. Um exemplo é mostrado na **Fig. 13**. Tal esquema representa o potencial de uma junção túnel, discutida na seção 4.8.1.

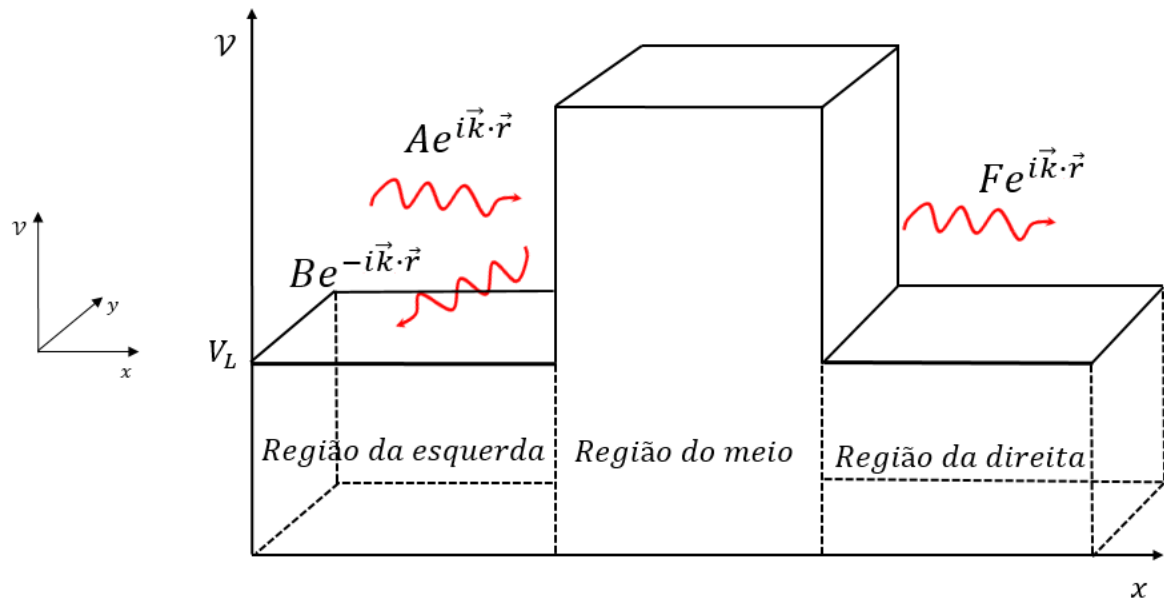


Figura 13 – Generalização da barreira quadrada. Nas regiões da esquerda e da direita o potencial é constante. Na região do meio o potencial também é constante. É representado as ondas incidente, refletida e transmitida.

A equação de Schrödinger é (BROCKS, 2005; GRIFFITHS, 2011)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \mathcal{V}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (4.70)$$

$$E\psi(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) - \mathcal{V}\psi(\vec{r}) = 0. \quad (4.71)$$

Usando o Laplaciano em coordenadas cartesianas, podemos fazer o seguinte:

$$\psi(x, y, z) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) - \mathcal{V} \psi(x, y, z) = 0, \quad (4.72)$$

$$\psi \left[E + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \mathcal{V} \right] \psi(x, y, z) = 0. \quad (4.73)$$

Em uma junção de túnel, a dimensão do dispositivo da junção é geralmente muito menor do que as dimensões paralelas às suas interfaces, **Fig. 14**. Assim, pode-se considerar essas dimensões infinitas, quando comparadas a dimensão do dispositivo através da junção (BROCKS, 2005). Logo, $\mathcal{V} = \mathcal{V}(x)$ e pode-se escrever a equação (4.73) como

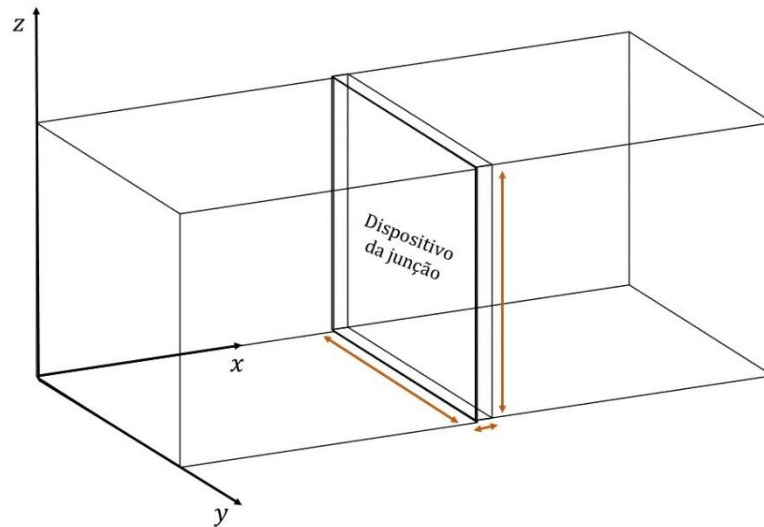


Figura 14 - Ilustração da junção de túnel. Pode-se notar que a dimensão do dispositivo da junção na direção \hat{x} é menor que as dimensões na direção \hat{y} e na direção \hat{z} .

$$\left[E + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mathcal{V}(x) \right\} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(x, y, z) = 0, \quad (4.74)$$

e, supondo soluções do tipo $\psi(x, y, z) = \varphi(x)\psi(y)\psi(z)$, obtém-se (BROCKS, 2005)

$$\left[E + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mathcal{V}(x) \right\} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \varphi(x) \psi(y) \psi(z) = 0, \quad (4.75)$$

e as soluções são (BROCKS, 2005)

$$\psi(x, y, z) = \varphi(x) e^{\pm i k_y y} e^{\pm i k_z z} = \varphi(x) e^{\pm i \vec{k}_{||} \cdot \vec{r}}, \quad (4.76)$$

onde $e^{\pm i \vec{k}_{||} \cdot \vec{r}}$ descreve uma partícula livre na direção paralela à barreira. Não é possível utilizar para a equação (4.76) as condições de contorno periódicas, pois a geometria do problema da junção túnel não permite e também porque está sendo levado em consideração limites quânticos da junção.

A função $\varphi(x)$ é obtida substituindo a equação (4.76) na equação (4.75)

$$E \varphi(x) + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{V}(x) \right\} \varphi(x) - \varphi(x) \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 - \varphi(x) \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 = 0, \quad (4.77)$$

$$E \left[\left(E - \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \right) + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{V}(x) \right\} \right] \varphi(x) = 0, \quad (4.78)$$

$$\left[E - \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2) + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{V}(x) \right\} \right] \varphi(x) = 0, \quad (4.79)$$

$$\left[E - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2 + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{V}(x) \right\} \right] \varphi(x) = 0, \quad (4.80)$$

$$\left[E_x + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{V}(x) \right\} \right] \varphi(x) = 0, \quad (4.81)$$

com energia

$$E_x = E - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2, \quad (4.82)$$

onde E_x a princípio pode assumir um contínuo de valores (RODRIGUES; UGARTE, 1999; BROCKS, 2005). Como a energia E do sistema é fixa, então os níveis de energia transversais, relacionado a $k_{||}$, definem os modos do sistema. Visto isso, analisar-se-á o problema de dispersão da onda no plano $(k_x, k_{||})$, **Fig. 15**.

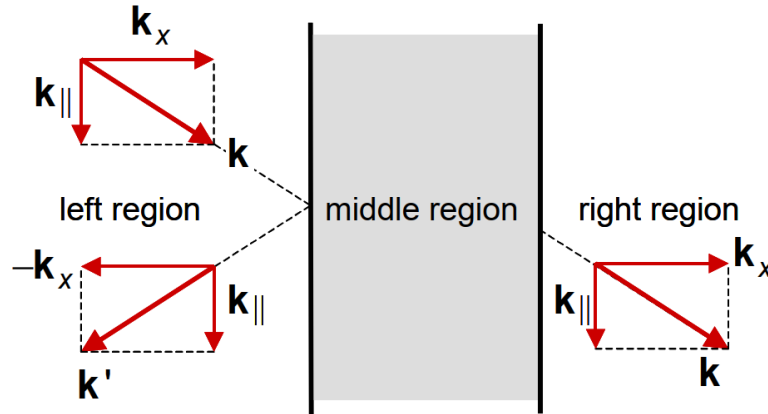


Figura 15 - Dispersão de uma barreira quadrada no plano $(k_x, k_{||})$. Fonte: (BROCKS, 2005, p. 6)

Analisando as regiões separadamente, obtém-se (BROCKS, 2005)

$$\psi_{k_{||}}(\vec{r}) = \begin{cases} A \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + r_{k_{||}}(E) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \right]; \vec{r} \text{ na região esquerda} \\ A \left[t_{k_{||}}(E) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right]; \vec{r} \text{ na região direita} \end{cases} \quad (4.83)$$

onde $\vec{k}' = (-k_x, k_{||})$. A amplitude da onda transmitida é $At_{k_{||}}(E)$ e representa uma fração da amplitude da onda incidente, isto é, se a probabilidade da onda transmitida for de 100%, então $|t_{k_{||}}(E)|^2 = 1$ e a amplitude da onda transmitida é A . A corrente de probabilidade definida na equação (4.28) se torna um vetor, dado por (BROCKS, 2005)

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\vec{r}, t) \nabla \psi^*(\vec{r}, t) - \psi^*(\vec{r}, t) \nabla \psi(\vec{r}, t)] \quad (4.84)$$

No entanto, para a maioria dos problemas, está-se interessado na corrente apenas na direção \hat{x} . Assim,

$$J_x = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi(x, y, z) \frac{\partial \psi^*(x, y, z)}{\partial x} - \psi^*(x, y, z) \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} \right]. \quad (4.85)$$

Usando a equação (4.83) na região da onda transmitida na equação (4.85), obtém-se a seguinte expressão para a corrente de probabilidade transmitida para um único modo $k_{||}$

$$J_{T,k_{||}} = |A|^2 \left| t_{k_{||}}(E) \right|^2 \frac{\hbar k_x}{m} = \rho \left| t_{k_{||}}(E) \right|^2 v_x. \quad (4.86)$$

Daqui em diante o raciocínio é semelhante ao da seção 4.8.3. Aplicando uma diferença de potencial $\Delta\mathcal{V} = -e\Delta V$, a componente x da densidade de corrente elétrica J transmitida se torna¹⁴

$$J_T = -2e\rho \sum_{E_F - \Delta\mathcal{V} < E_k < E_F} \left| t_{k_{||}}(E) \right|^2 v_x, \quad (4.87)$$

isso quer dizer que entre as regiões esquerda e direita, a corrente transmitida é transportada por todos os modos transversais que têm energia E_k no intervalo entre $E_F - \Delta\mathcal{V}$ e E_F .

Da equação (4.60) foi visto que $\rho = \frac{1}{2L}$. No caso tridimensional, usando estados normalizados, temos $\rho = \frac{1}{2L^3}$. Pode-se escrever $\sum_{E_F - \Delta\mathcal{V} < E_k < E_F} = \sum_{k_{||}} \sum_{k_x}$, onde é preciso somar apenas os estados com energia no intervalo indicado. (BROCKS, 2005)

Portanto, a equação (4.87) pode ser escrita como

$$J_T = \frac{-e}{L^3} \sum_{k_{||}} \sum_{k_x} \left| t_{k_{||}}(E) \right|^2 v_x, \quad (4.88)$$

da equação (4.65) foi visto que $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_x}{dk_x}$. Usando mesmo truque da equação (4.62), (4.63) e (4.64), tem-se que

¹⁴ O fator 2 ao princípio da exclusão de Pauli, isto é, em cada estado podemos ter 2 elétrons com a mesma energia, mas com spins em sentidos opostos.

$$J_T = \frac{-e}{L^3} \sum_{k_{||}} \sum_{k_x} |t_{k_{||}}(E)|^2 v_x \approx \frac{-e}{L^3} \sum_{k_{||}} \frac{L}{\pi} \int |t_{k_{||}}(E)|^2 v_x dk_x, \quad (4.89)$$

$$J_T = \frac{-e}{L^2} \frac{1}{\pi} \sum_{k_{||}} \int |t_{k_{||}}(E)|^2 \frac{1}{\hbar} \frac{dE_x}{dk_x} dk_x = \frac{-e}{L^2} \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{k_{||}} \int_{E_F - \Delta\mathcal{V} - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2}^{E_F - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2} |t_{k_{||}}(E)|^2 dE_x, \quad (4.90)$$

onde os limites de integração diferem da equação (4.66), pois a energia E_x é reduzida por um fator $\frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2$, advindo da equação (4.82). Ainda pode-se escrever a equação (4.90) como

$$J_T = \frac{-e}{L^2} \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{k_{||}} \int_{E_F - \Delta\mathcal{V} - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2}^{E_F - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2} \left| t_{k_{||}} \left(E_x + \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2 \right) \right|^2 dE_x = \frac{-e \Delta\mathcal{V}}{L^2} \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{k_{||}} |t_{k_{||}}(E)|^2, \quad (4.91)$$

onde $t_{k_{||}} \left(E_F - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2 \right)$ e $t_{k_{||}} \left(E_F - \Delta\mathcal{V} - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2 \right)$ não diferem muito, visto que $\Delta\mathcal{V}$ é pequeno, quando comparado a $E_F - \frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2$. $\Delta\mathcal{V}$ obtido experimentalmente vale aproximadamente $0.01V$, o que leva $\Delta\mathcal{V} = e\Delta V \sim 10^{-21} \text{Joule}$, o termo $\frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2 \sim 10^{-26} \text{Joule}$ e $E_F = 7eV \sim 10^{-18} \text{Joule}$ para o cobre ($\frac{\hbar^2}{2m} k_{||}^2$ é desprezível frente a E_F). Ou seja, $\Delta\mathcal{V}$ é três ordens de grandeza menor que E_F .

A corrente transmitida, considerando uma junção quadrada, **Fig. 16**, é dada por

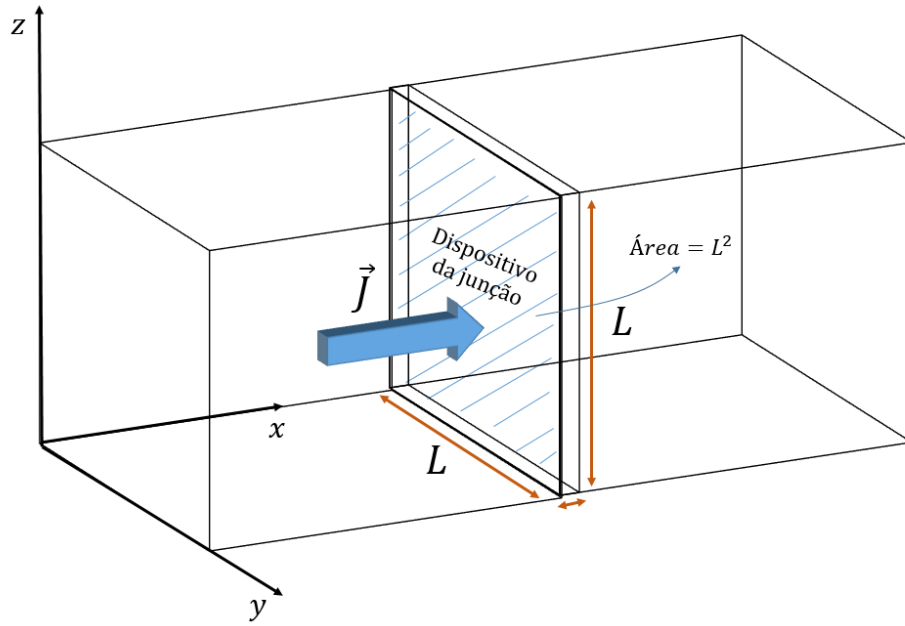


Figura 16 - Junção túnel quadrada. Representação da densidade de corrente elétrica \vec{J} .

$$I_T = \int \vec{J} \cdot d\vec{S} = J_T L^2, \quad (4.92)$$

a condutância elétrica $G = \frac{I_T}{\Delta V} = -\frac{eJ_T L^2}{\Delta V}$ se torna, usando a equação (4.91) e a equação (4.92)

$$G = -\frac{eI_T}{\Delta V} = -\frac{e \left[\frac{-e \Delta V}{L^2} \frac{\pi \hbar}{\pi \hbar} \sum_{k_{||}} |t_{k_{||}}(E)|^2 \right] L^2}{\Delta V}, \quad (4.93)$$

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{k_{||}} |t_{k_{||}}(E)|^2. \quad (4.94)$$

A expressão (4.94) é a fórmula de Landauer, com a transmissão total $T = \sum_{k_{||}} |t_{k_{||}}(E)|^2$ para dois reservatório com o sistema à $T = 0K$, exibida como uma soma sobre as transmissões dos modos transversais individuais $k_{||}$ (BROCKS, 2005).

4.8.5 Transporte de Carga em um Fio com Construção

A maneira como foi derivada a expressão (4.94) significa que pode ser facilmente generalizado para qualquer sistema onde o Hamiltoniano é separável em um termo que dependa apenas de x e um termo que dependa apenas de y e z (BROCKS, 2005). Por exemplo, as funções de onda do fio mostrado na **Fig. 18** pode ser escrita como

$$\psi(x, \vec{r}_\perp) = \varphi(x) \eta_{\vec{n}}(\vec{r}_\perp), \quad (4.95)$$

onde \vec{n} é um conjunto de dois números quânticos que rotulam os modos do sistema. A condutância deste fio quântico pode ser expressa como a soma das transmissões dos modos individuais (BROCKS, 2005)

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{\vec{n}} |t_{\vec{n}}(E)|^2. \quad (4.96)$$

Supondo o limite balístico, onde $|t_{\vec{n}}(E)|^2 = 1$, que representa a probabilidade de transmissão relacionada com cada modo transversal \vec{n} . Então, expressão (4.96) se torna (RODRIGUES; UGARTE, 1999; BROCKS, 2005; PAREDES, 2010; DAVIDSON, 2007; DAMYANOV et al., 2007)

$$G_{bal} = \frac{2e^2}{h} \sum_{\vec{n}} 1 = \frac{2e^2}{h} n = nG_0, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (4.97)$$

onde $G_0 \equiv 2e^2/h \approx 7,48 \times 10^{-5} S$ é o quantum de condutância e n é o número de modos transversais suportados pelo fio; G_{bal} é chamada de condutância balística. Note que n é um número inteiro.

Em um fio real sempre contém impurezas e imperfeições (defeitos de rede, limites de grão, átomos de impureza, etc.) e a dispersão desses defeitos domina a condutância. Mas, em fios finos e pequenos esses efeitos são amenizados e pode-se medir a quantização da condutância. (BROCKS, 2005)

Analisar-se-á agora os três limites para a condutância elétrica G , o limite clássico, semi-clássico e quântico.

4.8.5.1 Limite Clássico

Na **Fig. 17** é representado os três casos limites. O primeiro deles é quando $L, L_x, L_y \gg l$. Nessas condições, haverá uma grande quantidade de espalhamento antes do elétron chegar ao fim da constrição, de modo que deve-se tratar os portadores de carga como partículas.

Como o fio é metálico, não haverá acumulo de cargas em qualquer lugar da constrição. Então, usando as equações de Maxwell, temos (AGRAÏT; YEYATI; RUITENBEECK, 2003)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0. \quad (4.98)$$

Sendo $qE = F$, $qV = \mathcal{V}$, $F = -\vec{\nabla}\mathcal{V}$, implica em $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$. Assim,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = (\vec{\nabla})\vec{\nabla}V = \nabla^2 V = 0. \quad (4.99)$$

Que é a equação de Laplace. Resolvendo-a para um fio com constrição hiperbólica utilizando as coordenadas adequadas, obtém-se a seguinte expressão para a condutância elétrica (AGRAÏT; YEYATI; RUITENBEECK, 2003)

$$G = \frac{w}{L} \sigma, \quad (4.100)$$

com σ sendo a condutividade do material, mostrando que a condutância é uma função suave do diâmetro da constrição w , como esperado classicamente.

4.8.5.2 Limite Semi-clássico

Adotando-se o limite tal que $L < l$, sendo l o livre caminho médio do elétron. Neste caso, o elétron não sofrerá uma grande quantidade de espalhamentos consecutivos, mas passará quase que sem ser espalhado, sendo acelerado até o fim da constrição. Tal situação é referida como transporte balístico e foi observado pela primeira vez por Sharvin (AGRAÏT; YEYATI; RUITENBEECK, 2003). Para modelar o comportamento dos elétrons neste limite requer uma mistura de conceitos de mecânica quântica e mecânica clássica e é, portanto, chamado de limite semiclássico. A condutância neste limite é conhecida como a condutância de Sharvin e é dada por (AGRAÏT; YEYATI; RUITENBEECK, 2003)

$$G = \left(\frac{2e^2}{h} \right) \left(\frac{k_F w}{4} \right)^2, \quad (4.101)$$

onde h é a constante de Planck e k_F é o vetor de onda de Fermi. A condutância de a constrição neste limite é independente do material e aumenta quadraticamente com a seção transversal do fio.

4.8.5.3 Limite Quântico (nanofios)

Um nanofio é considerado um fio que existe em uma escala de $10nm$. Os nanofios metálicos não ocorrem na natureza, no entanto os nanofios moleculares sim, sendo a mais comum de todas as ocorrências o DNA, que é uma cadeia orgânica de moléculas na escala nm (DAVIDSON, 2007). Existem muitos métodos diferentes para a criação de nanofios, como, por exemplo, litografia por feixe de elétrons; epitaxia com feixe molecular, etc. (DAVIDSON, 2007).

A expressão para a condutância quântica pode ser obtida de diversas formas, uma delas é utilizando o formalismo de Landauer-Büttiker (AGRAÏT; YEYATI; RUITENBEECK, 2003; RODRIGUES; UGARTE, 1999; PAREDES, 2010), o mesmo utilizado no desenvolvimento teórico deste trabalho. Nessa descrição, considera-se um fio com diâmetro da ordem do comprimento de onda de *de Broglie* para os elétrons na superfície de Fermi λ_F (alguns nanômetros para o Cu, Au, W, etc.), a condutância

pode ser interpretada como a probabilidade de transmissão dos elétrons. E se também considerar-se que o comprimento do condutor é menor que o livre caminho médio dos elétrons ($L < l$), ou seja, o elétron atravessa a constrição, em média, sem sofrer espalhamentos (balístico), o coeficiente de transmissão $\mathcal{T} = 1$ e assim pode-se usar a equação (4.97).

Portanto, neste limite, a condutância deixa de variar continuamente e passar a variar em múltiplos inteiros de G_0 . Além disso, não há qualquer dependência com a geometria nem com o material em questão, ao contrário do observado macroscopicamente. Na **Fig. 17** pode-se ver um comparativo entre a condutância no limite clássico e quântico.

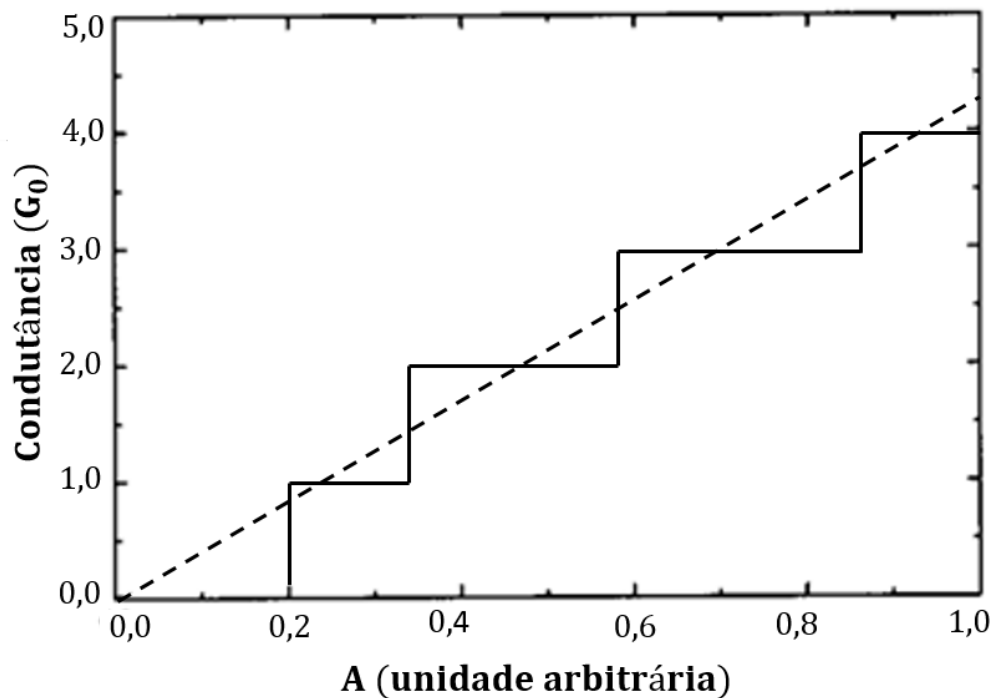


Figura 17 - Comparação qualitativa da dependência da condutância da seção transversal na descrição clássica (linha tracejada) e quântica (linha preenchida). Fonte: (RODRIGUES; UGARTE, 1999)

Nota-se da **Fig. 17** que a condutância clássica varia linearmente com a variação da seção transversal do fio. Na descrição quântica, pode-se observar o quantum de condutância, ou os chamados “canais” de condutância. Cada degrau é relativo a um valor de n . Para o nível do degrau 1, tem-se $n = 1$; para o nível do degrau 2, tem-se $n = 2$ e assim por diante. Da **Fig.18**, pode-se observar os três casos limites para um fio retangular.

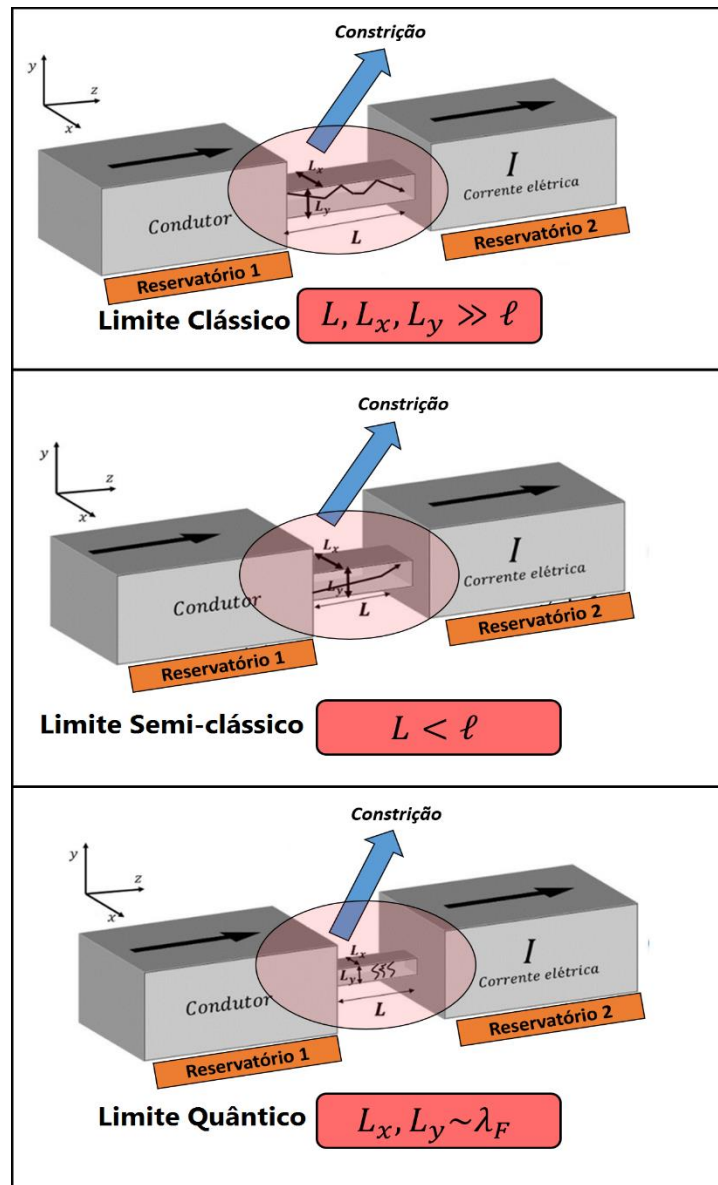


Figura 18 - Ilustração para os diferentes regimes de condução. (a) no regime difusivo, os elétrons se espalham muitas vezes enquanto estão na constricção. (b) no regime balístico podemos considerar não havendo espalhamento e o elétron é acelerado livremente. (c) a largura da constricção torna-se semelhante ao comprimento de onda de *de Broglie* dos elétrons na superfície de Fermi. Neste caso forma-se ondas estacionárias na direção transversal a corrente, o que limita o número de canais de condução.

Para ter-se uma ideia de como se comporta os estados do sistema quando o diâmetro de um fio é da ordem do comprimento de onda de *de Broglie* na superfície de Fermi, analisar-se a seguir um fio retangular, de acordo com a **Fig. 19**

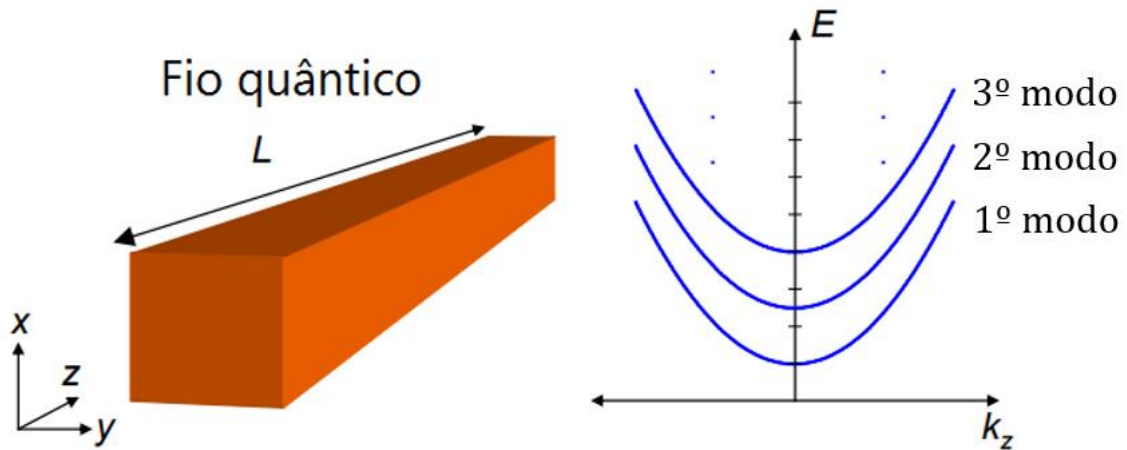


Figura 19 – Representação de um fio retangular com dimensões transversais (L_x, L_y) quantizadas. Ao lado direito do fio, tem-se as sub-bandas de energia do sistema, considerando o limite em que a energia varia continuamente em z , o que significa dizer que $L_z \gg L_x, L_y$. Fonte: (BALDO, 2011, p. 62)

Considerando que o potencial na lateral é infinito, tem-se que

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (4.102)$$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x}; k_y = \frac{n_y \pi}{L_y}; k_z = \frac{n_z \pi}{L_z}. \quad (4.103)$$

A superfície de Fermi é obtida fazendo $E = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$. Ao considerar que em z a energia varia continuamente¹⁵, i.e. $L_z \gg L_x, L_y$, e que apenas k_x e k_y contribuem para a energia de Fermi, tem-se

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad (4.104)$$

$$k_x^2 + k_y^2 = k_F^2, \quad (4.105)$$

¹⁵ A existência de degenerescência nos modos transversais faz com haja canais com larguras maiores que outros, como pode-se notar na Fig. 17. Isso pode ser explicado pelo fato de haver mais estados que podem ocupar os níveis de energia transversais.

que é uma circunferência de raio k_F^2 no espaço recíproco (espaço k). Neste espaço, o eixo k_x está espaçado em múltiplos inteiros de π/L_x e ao longo do eixo k_y , em múltiplos inteiros de π/L_y . Assim, o número de modos transversais n disponíveis para o sistema é (DAVIDSON, 2007)

$$n = \frac{1}{4} \frac{\pi k_F^2}{\frac{\pi}{L_x} \frac{\pi}{L_y}} = \frac{L_x L_y k_F^2}{4\pi}. \quad (4.106)$$

$$n = \frac{1}{4} \frac{\pi k_F^2}{\frac{\pi}{L_x} \frac{\pi}{L_y}} = \frac{L_x L_y k_F^2}{4\pi}. \quad (4.107)$$

E, se $L_x = L_y$, o comprimento L pode ser escrito como

$$L = n \frac{2\sqrt{\pi}}{k_F}. \quad (4.108)$$

Nota-se que ao aumentar as dimensões transversais do fio, os números de estados para o sistema aumentam. Ou seja, o número de estados disponíveis para o sistema são determinados por L . Para o cobre, por exemplo, $k_F = 1,36 \times 10^{-10} m^{-1}$, o que leva a $L_1 \approx 0,26 nm$, sendo L_1 é o comprimento para $n = 1$. Já para o tungstênio, $k_F = 1,60 \times 10^{-10} m^{-1}$, o que leva a $L_1 \approx 0,22 nm$.

No caso de contatos metálicos justapostos oscilando, há, a cada instante, o aparecimento e desaparecimento de vários modos transversais (devido mudanças nas dimensões do contato), que limitam a condutância em múltiplos inteiros de $G_0 \equiv 2e^2/h$. Se o nanocontato for modelado como retangular, os estados ocupados nessa região podem ser obtidos analogamente ao desenvolvimento anterior que resultou na equação (4.108), isto é, considerando que apenas os modos transversais contribuem para a energia de Fermi. Portanto, conclui-se que os primeiros canais de condutância estão relacionados a contatos com dimensões nanométricas.

5 METODOLOGIA

Para construção do aparato experimental para medida da condutância quântica foi utilizado equipamentos de baixo custo. A parte experimental é composta dos seguintes passos: construção de um circuito, montagem do aparato experimental e processo de medição. O esquema do circuito elétrico, baseado na referência (DAMYANOV et al., 2015), pode ser observado na figura a seguir:

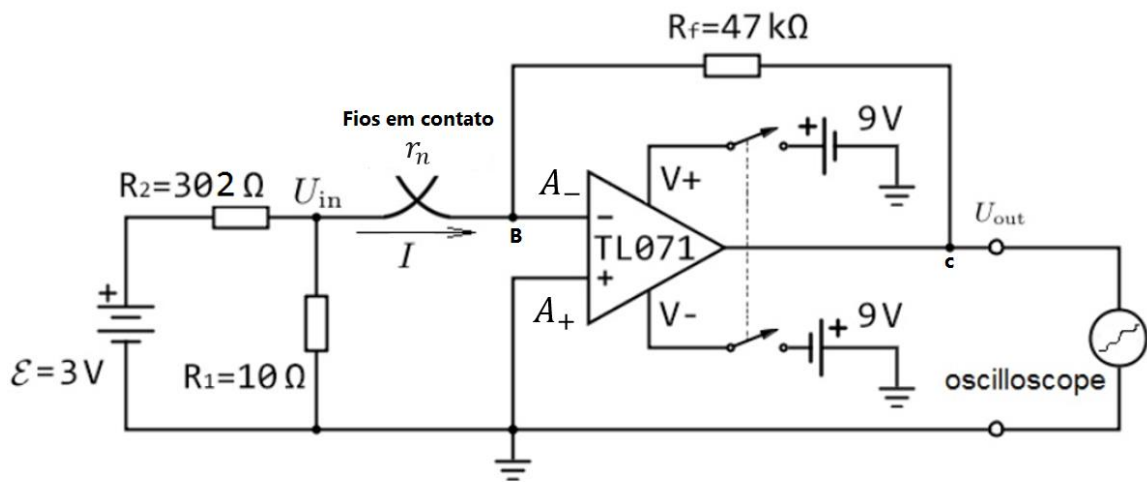


Figura 20 - Circuito elétrico amplificador de sinal para medida da condutância quântica.

Quando os fios estão em contato formam um quantum de condutância e eles podem ser apresentados como um resistor r_n . Nesse caso, a **Fig. 20** mostra o esquema de um amplificador inversor, que mede a tensão de entrada U_{in} do divisor de tensão formado por R_1 e R_2 . Para os valores de $R_1 = 10 \Omega$ e $R_2 = 302 \Omega$ a queda de tensão devido ao divisor é de aproximadamente $0,096 V$. O valor de R_1 e R_2 é escolhido de forma que a tensão de entrada do divisor U_{in} seja menor que a tensão máxima de saída do amplificador inversor (que é, no nosso caso, $9V$ que representa a tensão de saturação), dividida pelo seu ganho \mathcal{G}_n , ou seja

$$\mathcal{G}_n U_{in} < 9, \quad (5.1)$$

$$\mathcal{G}_n \frac{3R_1}{R_1 + R_2} < 9, \quad (5.2)$$

$$\frac{3R_1}{R_1 + R_2} < \frac{9}{\mathcal{G}_n}. \quad (5.3)$$

Com a obtenção de uma expressão para o ganho \mathcal{G}_n e pode-se saber para a tensão de entrada utilizada, quantos canais de condutância é possível obter experimentalmente.

A corrente elétrica I que percorre o nanocontato, representado pelo resistor r_n é dada por

$$I = \frac{U_{in} - A_-}{r_n}, \quad (5.4)$$

que é a mesma corrente que percorre o resistor R_f , pois a impedância de entrada de um amplificador operacional é muito alta. Assim, a tensão U_x entre os terminais do resistor R_f (tensão entre os pontos B e C) se torna

$$U_x = R_f I = R_f \frac{U_{in} - A_-}{r_n}. \quad (5.5)$$

A impedância de entrada do amplificador operacional é extremamente alta, o que faz com que a corrente elétrica I_{amp} que passa por ele seja aproximadamente nula. Então pode-se escrever a tensão no amplificador como

$$A_- - A_+ = I_{amp} r_{amp} \approx 0 \Rightarrow A_- \approx A_+ = 0, \quad (5.6)$$

pois A_+ está aterrado. Logo, a equação (5.5) se torna

$$U_x = R_f I = R_f \frac{U_{in}}{r_n}. \quad (5.7)$$

O ganho \mathcal{G} de um amplificador é dado por

$$\mathcal{G} = \frac{U_{out}}{U_{int}}, \quad (5.8)$$

considerando que $U_{out} = -U_x$ e usando a equação (5.7) em (5.8), obtém-se para o ganho a seguinte expressão

$$\mathcal{G}_n = -\frac{R_f}{r_n} = \frac{U_{out}}{U_{int}}. \quad (5.9)$$

Portanto, o ganho do amplificador é controlado modificando as resistências de R_f e/ou r_n .

Pode-se calcular o valor de r_n e assim saber o ganho para cada valor de n . Sabe-se, da primeira Lei de Ohm, que a tensão elétrica $U = RI$ e a condutância elétrica é $G = I/U$. Logo, concluímos que $R = 1/G$. Portanto, a resistência r_n pode ser escrita como

$$r_n = \frac{1}{G}, \quad (5.10)$$

Mas, como a condutância elétrica é $G = \frac{2e^2}{h}n$, implica que

$$r_n = \frac{h}{n2e^2}. \quad (5.11)$$

Utilizando o valor de $h = 6,626 \times 10^{-34} Js$ e $e = 1,602 \times 10^{-19}$ obtidos da referência (EISBERG; RESNICK, 1979), obtém-se a seguinte tabela para os cinco primeiros valores da resistência r_n e o ganho \mathcal{G} associado a cada uma delas

$r_n[K\Omega]$	\mathcal{G}
$r_1 = 12,9$	$-3,64$
$r_2 = 6,45$	$-7,28$
$r_3 = 4,30$	$-11,0$
$r_4 = 3,23$	$-14,56$
$r_5 = 2,58$	$-18,20$

Tabela 2 - Valores para a resistência no nanocontato e os valores do ganho associado a cada valor da resistência.

É possível obter a constante de Planck, bastando isolar h na equação (5.11)

$$h = 2ne^2r_n, \quad (5.12)$$

e, usando a equação (5.9), tem-se então

$$h = -2e^2R_f n \frac{U_{in}}{U_{out}}. \quad (5.13)$$

Assim, para medir a constante de Planck basta conhecer a tensão de saída e também qual o valor de n relativo aquela tensão.

As tensões de saída foram observadas em um osciloscópio digital. Conhecendo a tensão de entrada e o ganho para cada n , é possível saber se a tensão de saída observada é relativa a algum canal de condutância. Por exemplo, digamos que você ao fazer a medida observe no osciloscópio o seguinte, **Fig. 21**:

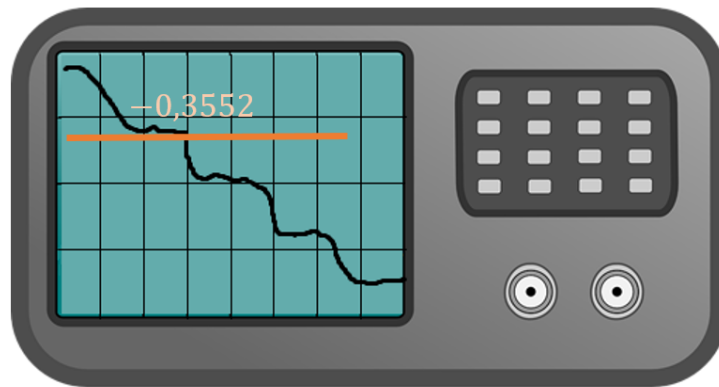


Figura 21 - Ilustração de uma possível medida no osciloscópio.

Ao tirar uma média na região onde há um provável canal de condutância (isso pode ser feito em um *software* de análise de dados), você percebeu que o valor médio da tensão de saída foi de $-0,3552$. Para saber se fato este patamar está no canal 1, basta dividir o valor da tensão de saída pela tensão de entrada que é de $0,096V$. Neste exemplo, obtemos $\mathcal{G} = -3,7$. Portanto, o patamar está bem próximo do canal 1. E assim por diante, até que seja analisado cada degrau, prováveis canais de condutância.

Atendo-se agora a atenção para a montagem da parte mecânica e elétrica do aparato experimental.

As partes elétricas são mostradas na **Fig. 22**. Utilizamos duas pilhas alcalinas de $1,5V$ em série, ou seja, os $3V$ que aparecem no circuito da **Fig. 20**. O amplificador operacional utilizado foi o TL071, pois dos que foram testados este foi o que tinha melhor tempo de resposta. Para a alimentação do amplificador foi utilizado duas baterias alcalinas de $9V$. Além disso, utilizou-se três resistores, um de 10Ω e outros dois em paralelo de 604Ω , gerando uma resistência equivalente de 302Ω ; três conectores BNC, onde dois deles foram usados para conectar os cabos relativos ao nanocontato e o outro foi utilizado para conectar o cabo de saída para o osciloscópio. Também se usou uma chave para ligar e desligar o circuito. Foi feita uma caixa metálica, que serviu como uma gaiola de Faraday para suprimir a interferência eletromagnética do ambiente (esta caixa é de extrema importância, visto que as medidas feitas são de tensões muito pequenas e as interferências externas são bastantes significativas).

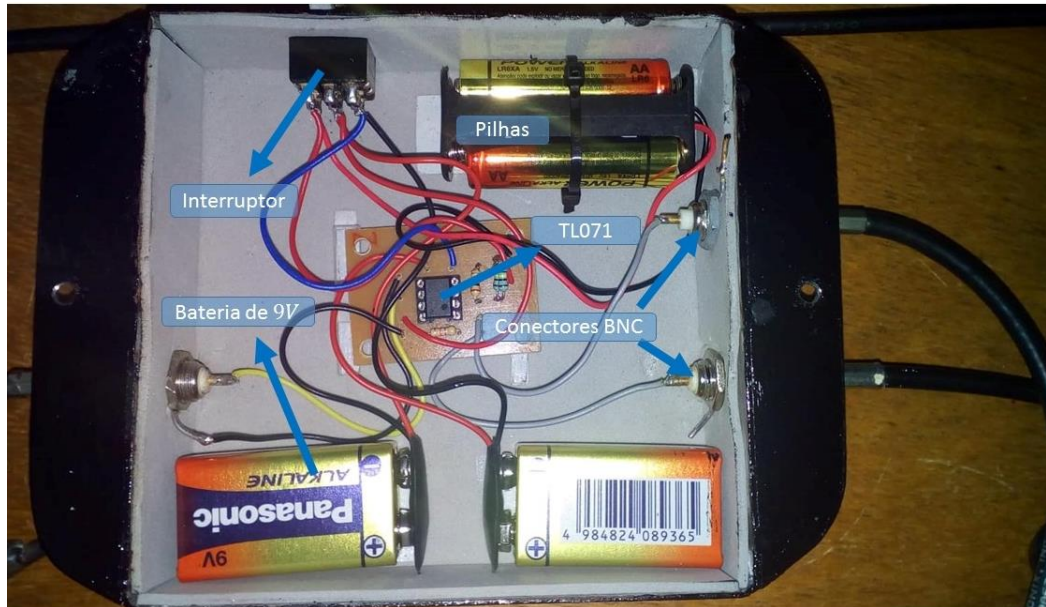


Figura 22 - Parte elétrica do aparato experimental.

As partes mecânicas do processo de medição foram feitas de duas formas diferentes. A seguir serão apresentadas cada uma delas:

Metodologia 1 – Primeiro foi utilizado fios de cobre de 0,20mm e depois fios de tungstênio de 0,25mm. Os fios de cobre (e posteriormente o de tungstênio) foram postos perpendicularmente em contato de modo que sempre fosse possível observar uma oscilação de um fio em relação ao outro. A saída do circuito foi conectada ao osciloscópio. As medidas foram feitas de uma e uma, deixando a função *single* do osciloscópio ativada. Cada medida foi salva em um *pendrive* para posterior análise em um *software* de análise de dados. A **Fig. 23** ilustra a situação

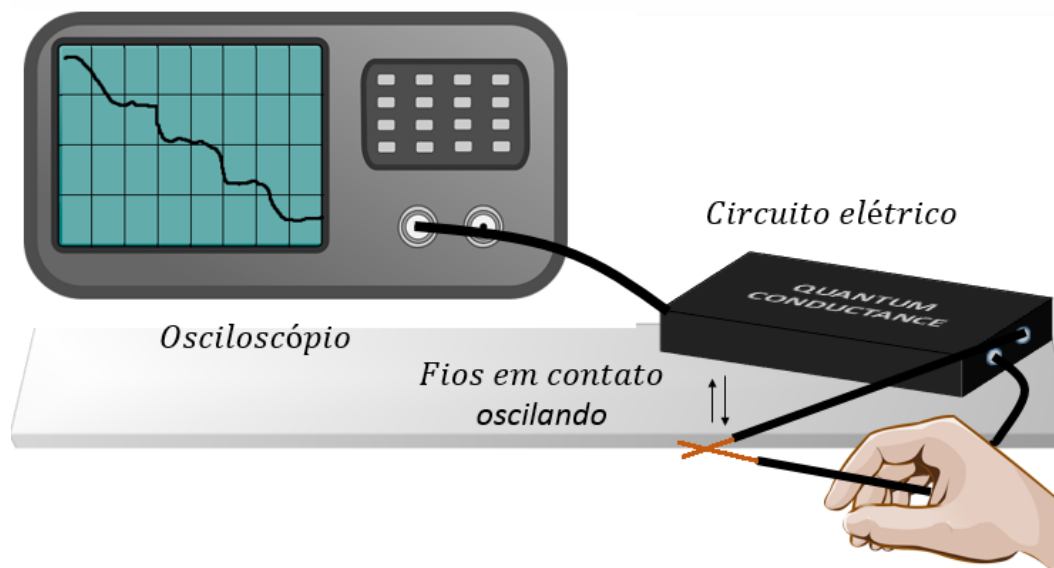


Figura 23 - Medida da condutância quântica. Metodologia 1.

Para realizar as medidas, conectou-se um cabo BNC a uma das entradas do osciloscópio e na extremidade dos outros dois cabos soldou-se os fios de cobre (você pode usar um conector BNC e soldar os fios na ponta do conector). Após isso, ligou-se o interruptor para alimentar o amplificador operacional e o circuito começou a funcionar. Em seguida, definiu-se a escala de tempo do osciloscópio de $5,000\mu s$ e a escala de tensão em $1,00V$ por divisão. Colocando-se os fios em contato, deve-se observar algo parecido com a **Fig. 24**.

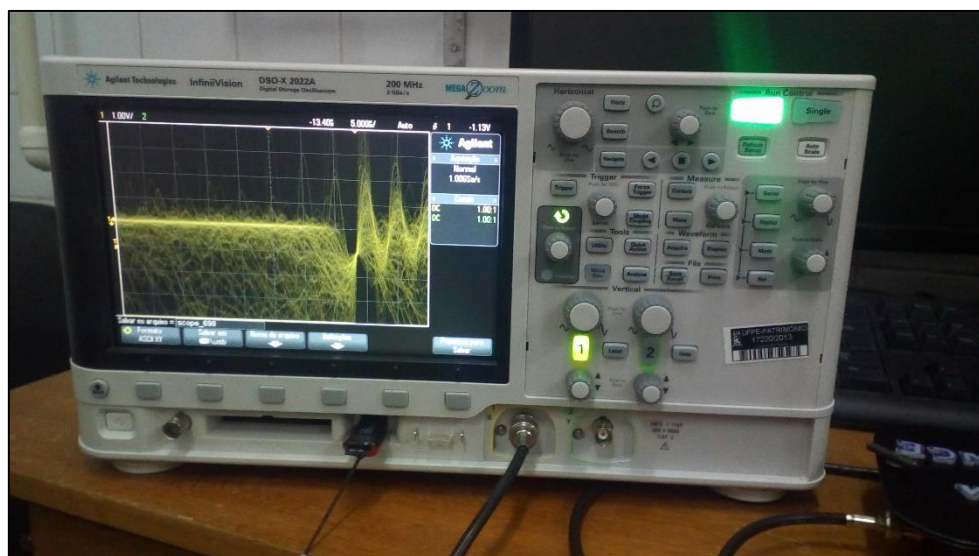


Figura 24 - Oscilação dos fios justapostos fazendo e desfazendo nanocontatos. A observação é feita em um osciloscópio digital com a função *single* ainda desligada.

Após isso, liga-se a função *single* do osciloscópio. Esta função mostra apenas uma medida por vez na tela. As medidas foram salvas quando era observado visualmente algum canal de condutância, como os da **Fig. 25**, **Fig. 26** e **Fig. 27**.

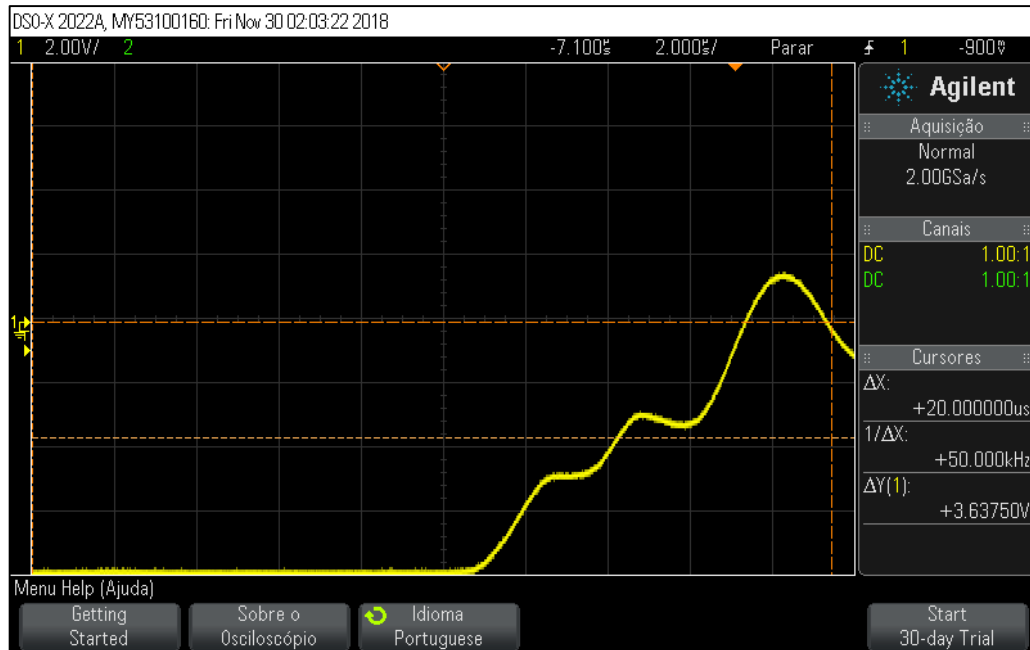


Figura 25 - Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio.



Figura 26 - Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio. Aqui há, aparentemente, mais canais, mas com alguns não estão formando degraus tão perfeitos.

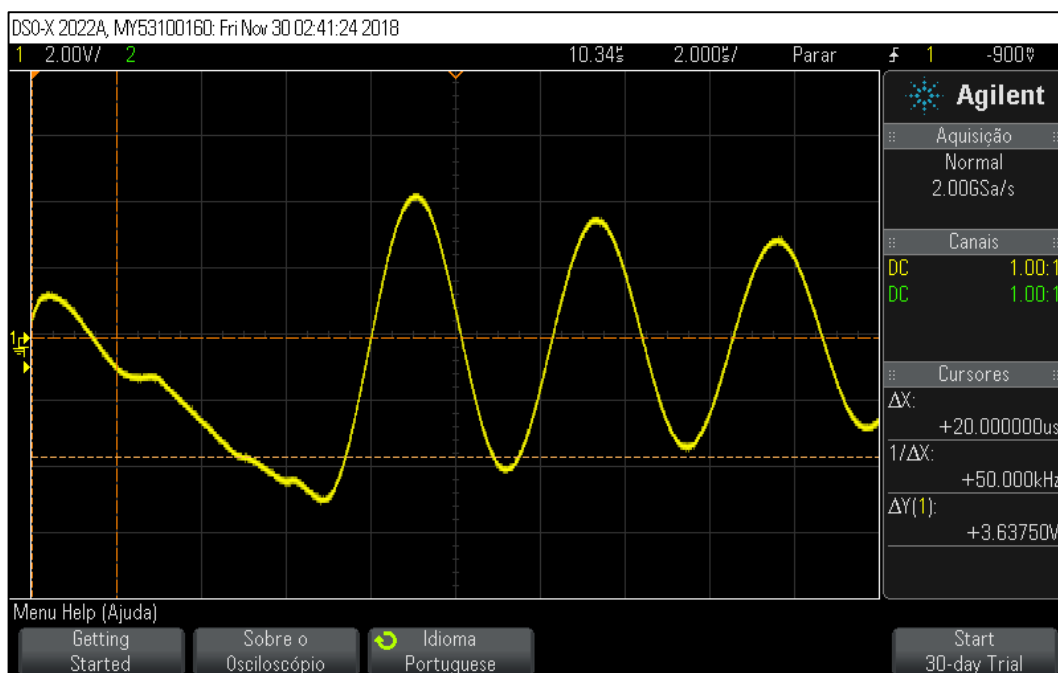


Figura 27 - Possíveis canais de condutância observados na tela do osciloscópio. Aqui, pode ser observado mais aparentemente as oscilações devido ao *setting time* do amplificado operacional.

Pode-se notar que nem sempre aparece degraus perfeitos, isto é, bem planos. Isso pode ser explicado pelo tempo de resposta do amplificador, o *setting time*, que é o tempo em que a saída do amplificador demora para se estabilizar no valor desejado numa transição. Isso explica o fato de também observa-se valores positivos de tensão, como os da **Fig. 25** e **Fig. 27**. Ao observar degraus como os das figuras citadas, a medida era então salva para posterior análise.

Metodologia 2 - Foi utilizado os mesmo fios e o mesmo circuito elétrico apresentado anteriormente. A diferença foi na parte mecânica. A oscilação não foi mais manual, foi utilizado um micromotor vibracall de telefone celular. Para o funcionamento do micromotor a alimentação com uma pilha comum pode ser utilizada, mas utilizou-se uma das saídas de um Arduino. Um dos terminais do micromotor foi conectado na saída PWM do Arduino e o outro terminal foi conectado ao terra (GND). A função PWM, por meio do *duty cycle*, controla a tensão média de saída. Foi dessa forma que foi controlada a vibração do micromotor.

O micromotor foi fixado com fita adesiva e em cima dele foi fixado um dos fios (um de pedaço menor) e outro fio, de tamanho maior, ficou livre para oscilar, **Fig. 28**. Toda essa parte mecânica foi colocada em uma caixa metálica para redução de

interferências externas, **Fig. 29**. Daqui em diante o procedimento foi igual ao da **Metodologia 1**. Tentou-se também utilizar um piezoelétrico para fazer os fios oscilarem, mas deixou-se de lado, pois o micromotor vibracall apresentou melhor eficácia e facilidade para as medições.

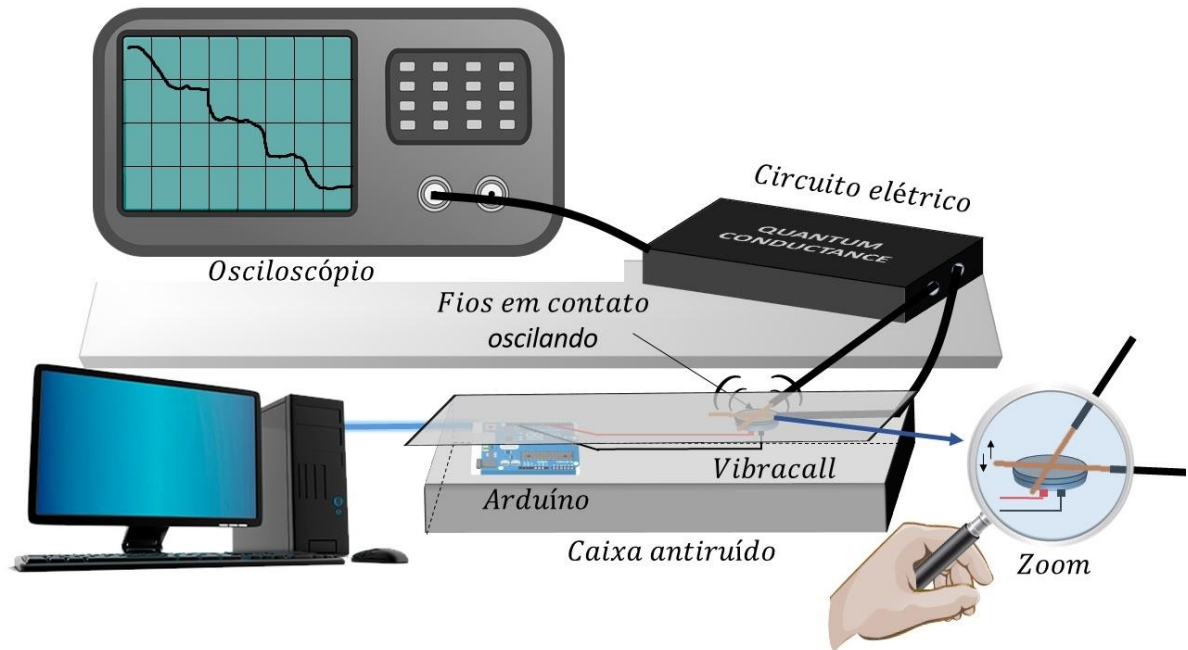


Figura 28 – Medida da condutância quântica. Metodologia 2.

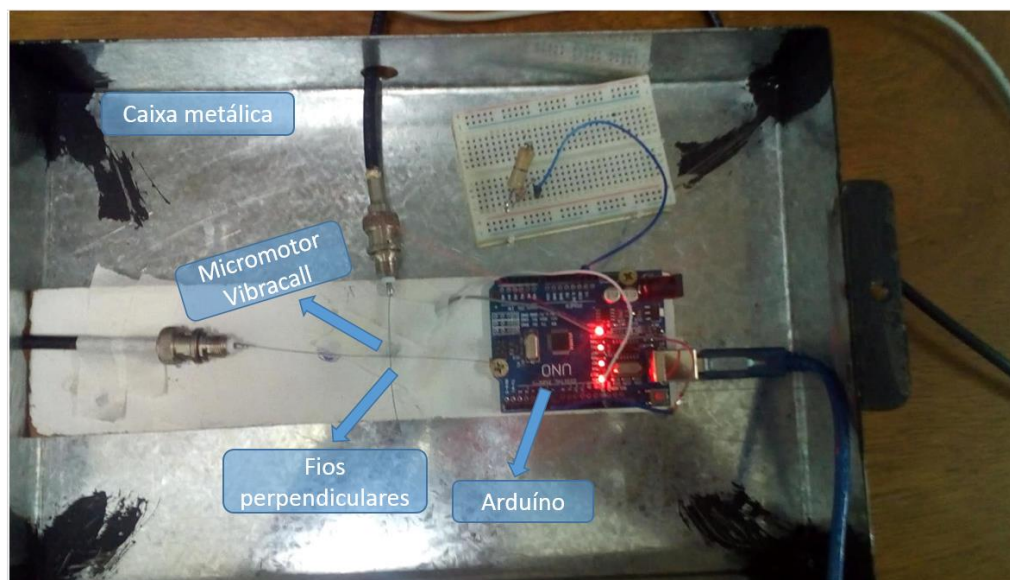


Figura 29 – Parte mecânica da medida de condutância quântica. Na figura podemos ver também um protoboard, que foi utilizado, a priori, para reduzir a vibração do micromotor, mas, por fim, foi mantida apenas a função PWM do arduino.

Alguns cuidados devem ser tomados, como, por exemplo, não fazer muita pressão ao encostar os fios, pois isto desfaz os nanocontatos, passando a ter um contato macroscópico; tentar manter os fios o mais perpendicular possível; não tocar nos fios, para não interferir no circuito; e ter bastante cuidado para não amassar os fios.

No geral, foram feitas em torno de 800 medidas para cada fio. Esse total de medidas foi dividido utilizando as duas metodologias. Essa grande quantidade foi necessária, pois nem sempre o que era observado visualmente era de fato um canal de condutância, sendo necessário a construção de histogramas globais.

Todos os dados foram salvos e analisados. As curvas que se apresentavam muito fora do esperado (não formando patamares bem definidos) eram descartadas. As outras curvas foram salvas em tabelas para posterior análise.

Para o cálculo da constante de Planck foi utilizada a fórmula (5.13) substituindo U_{out} por \bar{U}_{out} , onde \bar{U}_{out} é uma tensão média de saída, advinda da média aritmética dos patamares observados para determinado canal.

As incertezas foram calculadas da seguinte maneira: considerando uma medida f , onde $f = f(a_1, a_2, a_3, a_n \dots)$, e Δa_n é a incerteza de a_n , a incerteza de f , Δf , é dada por (RECKTENWALD, 2006; ARRAS, 1998)

$$\Delta f = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial a_1}\right)^2 (\Delta a_1)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a_2}\right)^2 (\Delta a_2)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a_3}\right)^2 (\Delta a_3)^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial a_n}\right)^2 (\Delta a_n)^2}, \quad (5.14)$$

Para a constante de Plack, sendo $h = -2e^2 R_f n U_{in} / U_{out}$, isto é, $h = h(U_{in}, R_f, U_{out})$, com $e = 1,602 \times 10^{-19}$ uma constante (EISBERG; RESNICK, 1979), a incerteza Δh é dada por

$$\Delta h = \sqrt{\left(2e^2 n \frac{U_{in}}{U_{out}}\right)^2 (\Delta R_f)^2 + \left(2e^2 R_f n \frac{1}{U_{out}}\right)^2 (\Delta U_{in})^2 + \left(2e^2 n \frac{U_{in}}{U_{out}^2}\right)^2 (\Delta U_{out})^2}, \quad (5.15)$$

com $\Delta R_f = 0,05\Omega$; a tensão de saída é obtida por (LEÃO, [201?]) $\Delta U_{out} = \sqrt{\sigma_{U_{out}}^2 + \Delta U_{out,instru.}^2}$, sendo $\sigma_{U_{out}}$ a incerteza da média e $\Delta U_{out,instru.}$ a incerteza instrumental da medida de tensão, que é $\Delta U_{out,instru.} = 0,01V$. A incerteza da tensão

de entrada é $\Delta U_{in} = \sqrt{\left(\frac{3}{R_1+R_2}\right)^2 (\Delta R_1)^2 + \left(-\frac{3R_1}{(R_1+R_2)^2}\right)^2 (\Delta R_2)^2}$, onde $\Delta R_1 = 0,05\Omega$ e $\Delta R_2 = 0,01\Omega$ (que é a incerteza do resistor em paralelo).

Foi construído um roteiro experimental, onde pode ser usado em disciplinas de Laboratório de Física. Este roteiro pode ser visto no **APÊNDICE C**.

6 RESULTADOS

Todos os dados obtidos (tabelas, gráficos, histogramas) estão apresentados nesta seção. Inicialmente é apresentado os resultados para a quantização da condutância para fios de cobre com diâmetro de 0,20mm. Em seguida, o histograma global, onde são representados o acúmulo das contagens obtidas em cada curva de uma série de medidas (sob mesmas condições experimentais). Logo após, uma tabela com a obtenção experimental da constante de Planck. Os resultados para os fios de tungstênio com diâmetro de 0,25mm seguiram o mesmo procedimento.

Na **Fig. 30** e na **Fig. 31** são apresentados os resultados para a quantização da condutância para o cobre.

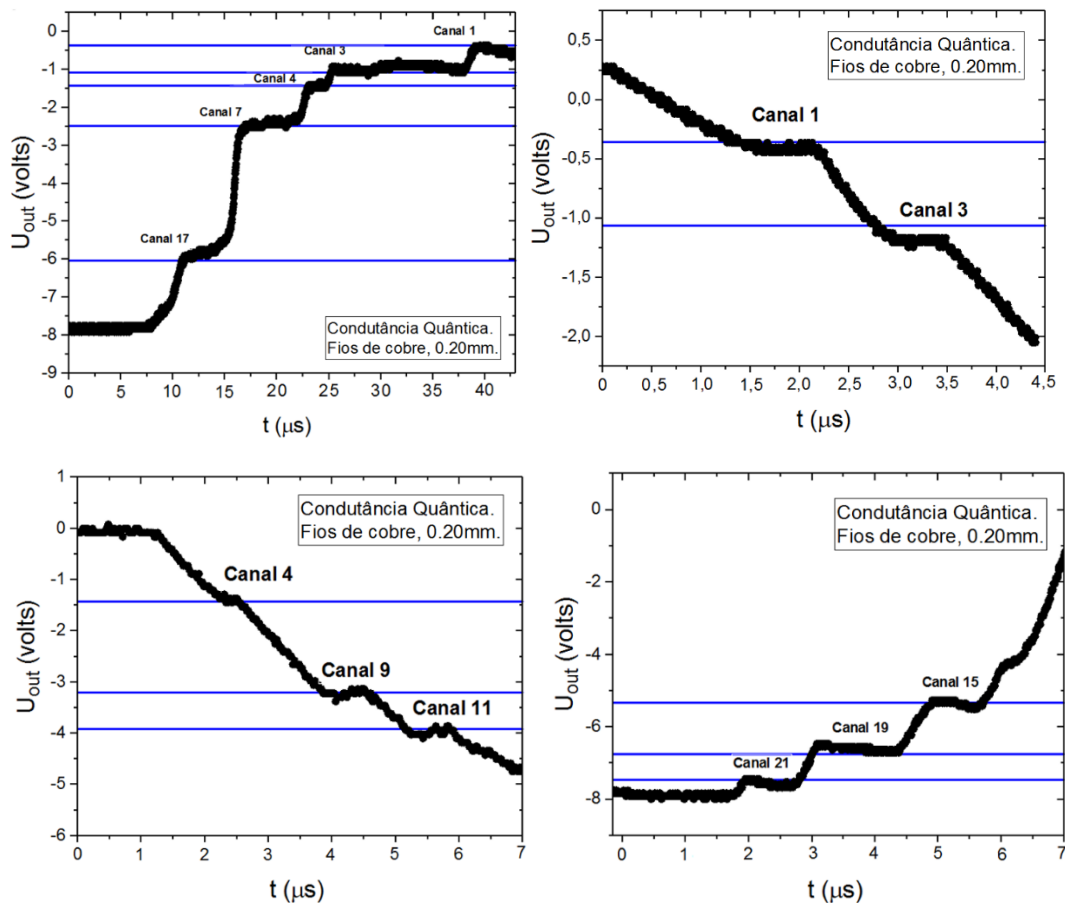


Figura 30 – Medidas típicas de condutância quântica para o cobre.

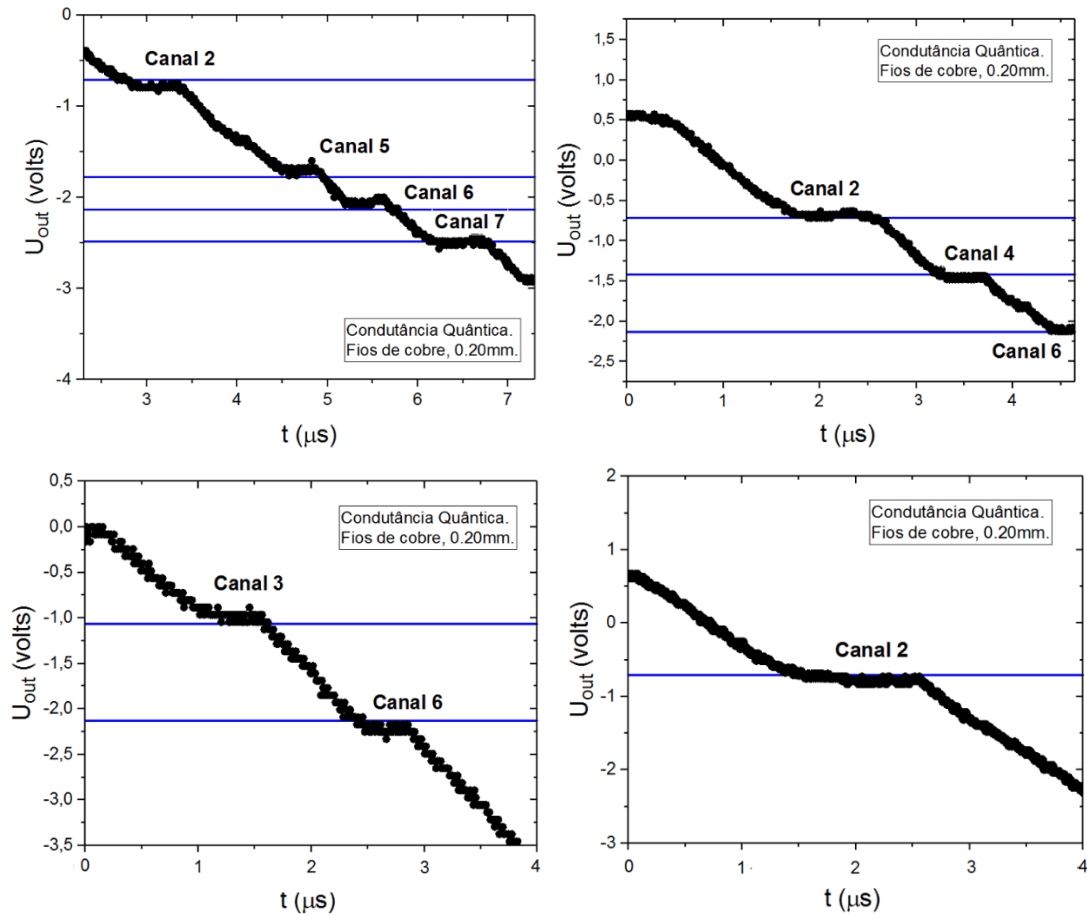


Figura 31 – Mais algumas medidas típicas de condutância quântica para o cobre.

A análise dos resultados experimentais apresenta uma grande dificuldade: as curvas para a condutância quântica não são repetidas. Isso é justificado pela forma como a medida é realizada. Como não temos o controle da dinâmica de variação da área de contato dos fios, é interessante montar histogramas globais, onde são representados o acúmulo das contagens obtidas para cada curva. Com esses histogramas pode-se apresentar o comportamento geral da condutância dos nanocondutores. Pode-se observar na **Fig. 32** o histograma para o cobre.

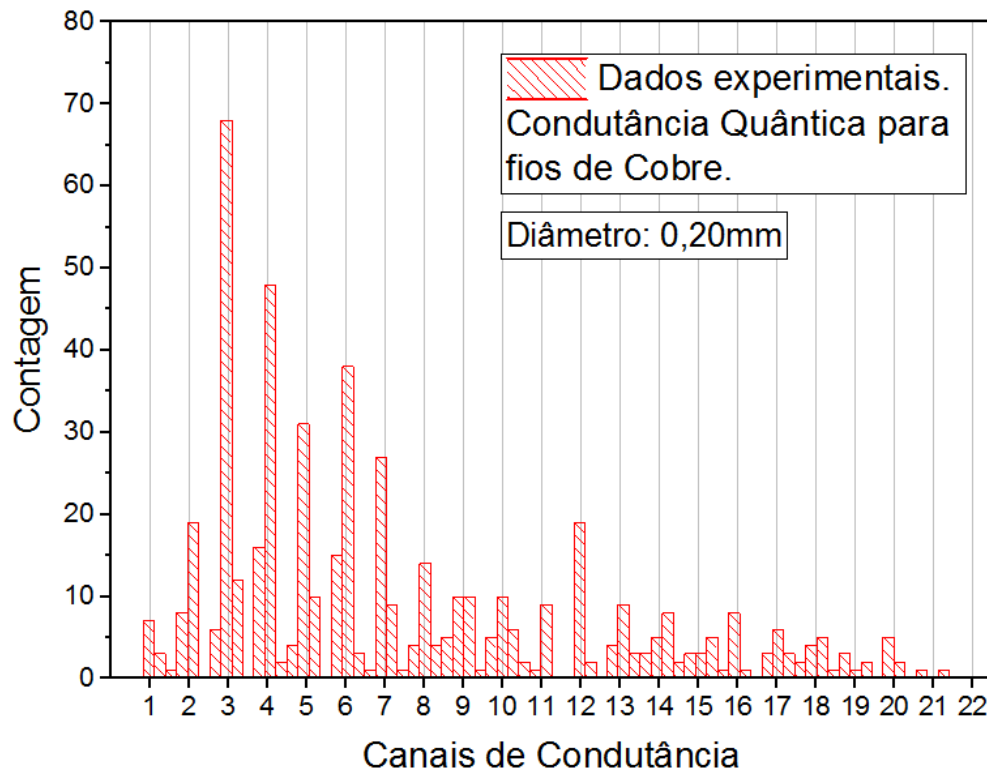


Figura 32 - Representação na forma de histograma das curvas de condutância para o cobre, num total de 525 patamares de condutância analisados.

A partir do histograma foi calculado a constante de Planck (e a partir dela a condutância quântica) para os primeiros cinco canais de condutância. Essas medidas foram feitas considerando uma tensão média de saída, onde a média foi feita sobre todos os valores relativos a cada canal. Na **Tabela 3** pode-se observar os valores obtidos para o cobre.

$U_{out} [V]$	Canal (n)	Condutância [$10^{-5} S$]	$h [10^{-34} J s]$	Erro relativo (%)
$-0,37 \pm 0,04$	1	$7,7 \pm 0,9$	$6,3 \pm 0,7$	4,9
$-0,71 \pm 0,04$	2	$15,5 \pm 0,2$	$6,5 \pm 0,4$	1,9
$-1,06 \pm 0,04$	3	$23,24 \pm 0,08$	$6,54 \pm 0,3$	1,3
$-1,42 \pm 0,04$	4	$30,99 \pm 0,07$	$6,53 \pm 0,2$	1,4
$-1,77 \pm 0,04$	5	$38,73 \pm 0,06$	$6,55 \pm 0,2$	1,1

Tabela 3 – Valores da tensão média de saída para o cobre para cada canal de condutância n , os valores experimentais relativos a condutância quântica e valores obtidos para a constante de Planck h acompanhado do erro relativo, utilizando para h o valor de referência $6,626 \times 10^{-34} J s$ e $e = 1,602 \times 10^{-19}$.

Na **Fig. 33** é apresentado os resultados para o fio de tungstênio, de diâmetro 0,25mm.

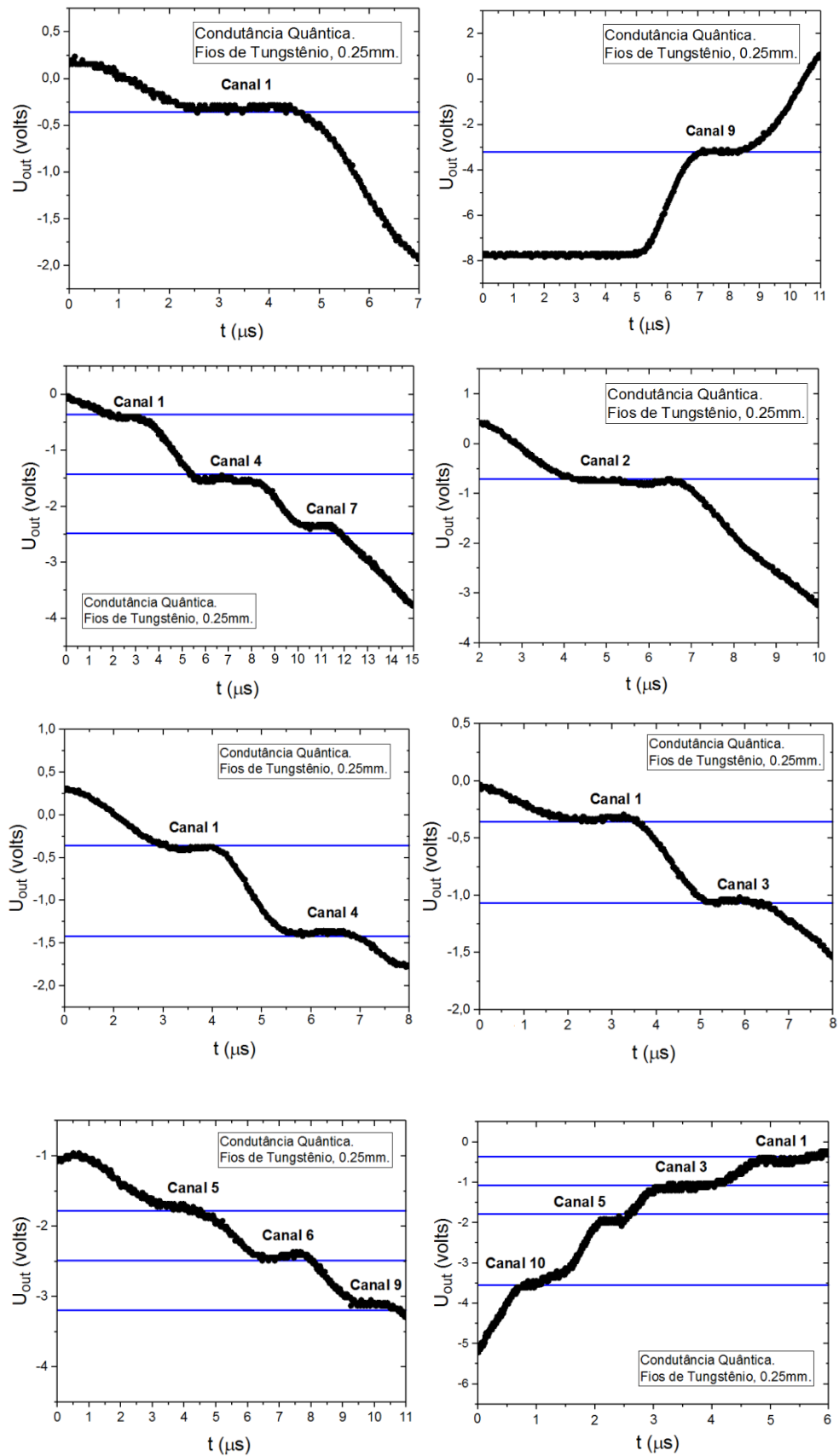


Figura 33 – Medidas típicas de condutância quântica para fios de tungstênio.

O histograma global para o tungstênio é apresentado na **Fig. 34**

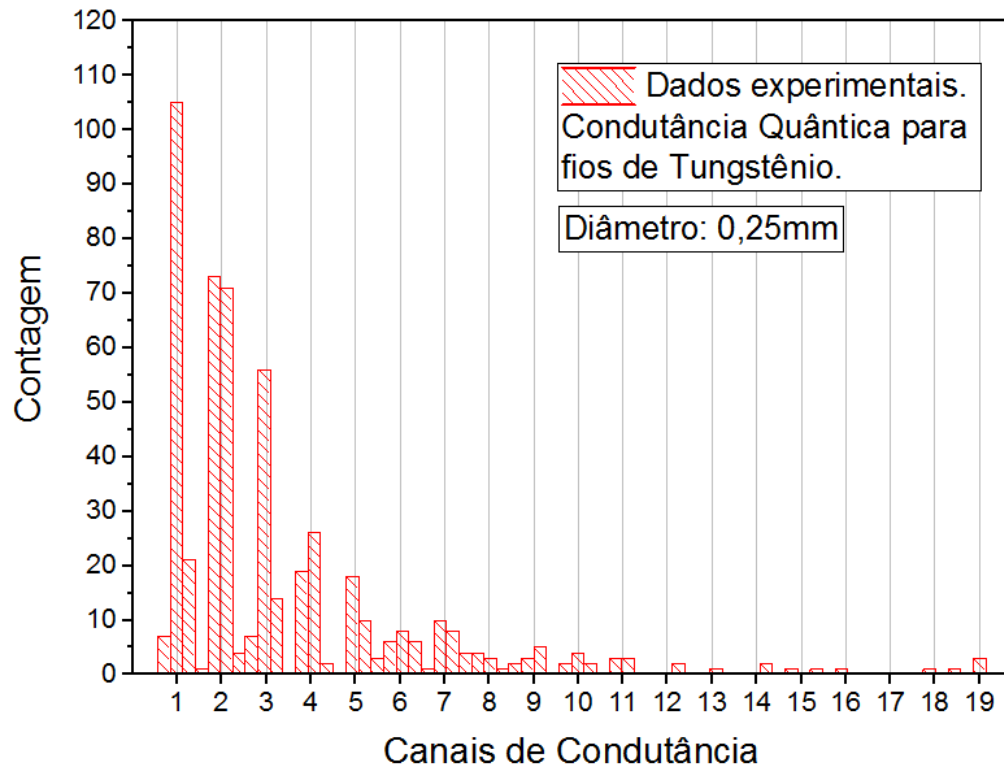


Figura 34 - Representação na forma de histograma das curvas de condutância para o tungstênio, num total de 526 patamares de condutância analisados.

E na **Tabela 4** os valores obtidos para a constante de Planck para os primeiros cinco canais de condutância utilizando fios de tungstênio

U_{out} [V]	Canal (n)	Condutância [$10^{-5} S$]	h [$10^{-34} J s$]	Erro relativo (%)
$-0,37 \pm 0,05$	1	$7,7 \pm 0,3$	$6,3 \pm 0,8$	4,9
$-0,71 \pm 0,04$	2	$15,5 \pm 0,1$	$6,6 \pm 0,4$	0,4
$-1,06 \pm 0,05$	3	$23,24 \pm 0,08$	$6,57 \pm 0,3$	0,8
$-1,42 \pm 0,04$	4	$30,99 \pm 0,07$	$6,55 \pm 0,2$	1,1
$-1,79 \pm 0,04$	5	$38,73 \pm 0,06$	$6,49 \pm 0,1$	2,0

Tabela 4 – Valores da tensão média de saída para o tungstênio para cada canal de condutância n , os valores experimentais relativos a condutância quântica e valores obtidos para a constante de Planck h acompanhado do erro relativo, utilizando para h o valor de referência $6,626 \times 10^{-34} J s$ e $e = 1.602 \times 10^{-19}$.

7 DISCUSSÕES

7.1 MEDIDAS DE CONDUTÂNCIA

A quantização da condutância é observada quando o diâmetro do contato entre os fios é aproximadamente da ordem do comprimento de onda dos elétrons na superfície de Fermi (que são os que participam diretamente da condução elétrica), que é da ordem de nanômetros. A condutância observada está relacionada ao número de canais ocupados abaixo do nível de Fermi. O número de canais abaixo desse nível é dado pela seção transversal da nanoestrutura (RODRIGUES; UGARTE, 1999; RODRIGUES, 1999). Ao variar o contato entre os fios, constrói-se e desconstrói-se nanocontatos, mudando assim o número de canais ocupados e com isso mede-se os saltos abruptos na condutância (no nosso caso na tensão de saída observada no osciloscópio). Ao encostar os fios há inicialmente a construção de nanocontatos, que desaparecem quando a pressão entre os fios aumenta, aumentando a área de contato. Quando os fios vão desencostando há a desconstrução dos canais de condutância, isto é, a condutância diminui em patamares abruptos, até se anular, quando os fios não estão mais em contato, **Fig. 35**. O limite quântico e clássico aparecem e desaparecem a todo momento, pois não temos controle direto do diâmetro do contato entre os fios.

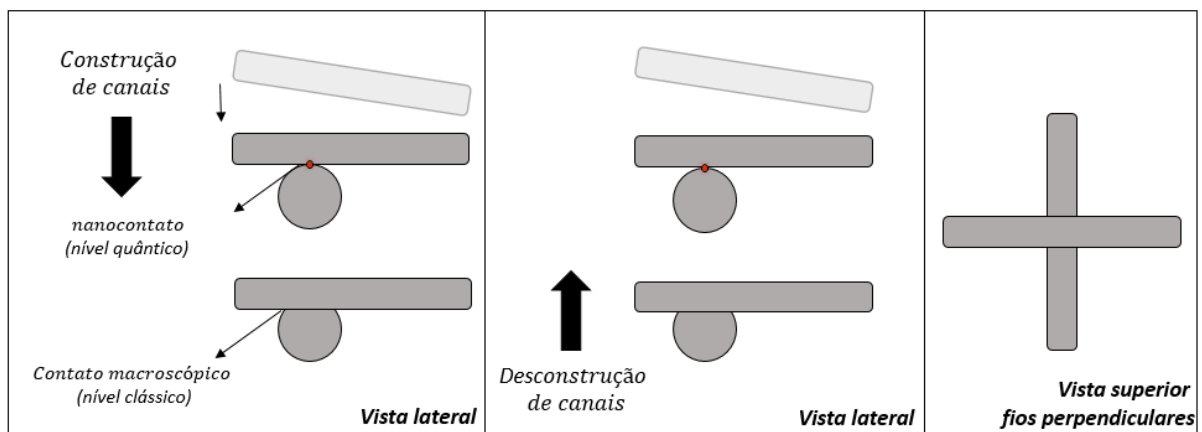


Figura 35 - Construção e desconstrução dos canais de condutância até chegar ao nível clássico.

Temos a vista lateral e superior dos fios superpostos perpendicularmente.

Então, durante o processo de medição pode-se obter em uma medida tensões de saída relativas também a uma possível condutância clássica, que é quando o diâmetro do contato entre os fios se torna macroscópico.

7.2 DESEMPENHO DO APARATO EXPERIMENTAL

A preparação do aparato experimental se mostrou bastante simples, consistindo apenas na montagem de um circuito elétrico e na justaposição entre dois fios metálicos, não necessitando de nenhum ambiente especial (como vácuo, temperatura controlada, etc.). As caixas metálicas serviram apenas como “ajuste fino”, para redução de ruídos. Os cuidados foram basicamente não criar dobras nos fios (que no caso do fio de cobre foi preciso um cuidado maior, visto que ele é mais maleável que o tungstênio) e mantê-los sempre o mais perpendicular possível para a criação de nanocontatos. No circuito elétrico foram utilizadas pilhas, pois, desta forma, há menores ruídos quando comparados a ligação direta em uma rede elétrica por meio de alguma fonte de alimentação.

O circuito elétrico montado fornece valores de tensão de saída simétrica próxima a $\pm 9V$ (que foi a alimentação utilizada no amplificador). Da forma que o circuito foi montado, como já visto, o ganho é negativo, tornando possível a obtenção de pelo menos os 25 primeiros canais de condutância. Canais maiores que esses ultrapassam a tensão de saturação do amplificador.

Deve-se escolher um amplificador operacional com pequeno tempo de resposta quando comparado a frequência de construção e quebra dos canais de condutância. O TL071 é relativamente eficiente nesse processo de medição, mas ainda é possível perceber oscilações nas tensões de saída, como as observadas na **Fig. 27**. O controle do número de canais de condutância a serem observados pode ser controlado alterando os resistores do divisor de tensão.

Quanto as observações das curvas de condutância no osciloscópio, estas aparecem bem nítidas, apesar de algumas vezes serem mascaradas pelas oscilações devido o tempo de resposta do amplificador. É preciso certa paciência para armazenar

os dados, visto que foi feito uma medida por vez, utilizando a função *single* do osciloscópio.

A justaposição dos fios de forma manual se mostrou relativamente eficiente, mas a pressão exercida ao coloca-los em contato acaba gerando altos canais de condutância e o controle mecânico da oscilação se torna bastante difícil. No entanto, a utilização do processo de medida dessa maneira serve como uma análise a priori para aquisição de dados. Já a utilização do micromotor vibracall para a oscilação dos fios se mostrou mais prática que o procedimento manual, pois tínhamos um certo controle da oscilação. Reduzindo a vibração do micromotor (mudando a tensão aplicada aos terminais do mesmo, por meio da função PWM) foi possível obter os primeiros canais de condutância, tanto para o cobre, quanto para o tungstênio.

Em resumo, apesar de não haver o controle direto da dinâmica de construção e desconstrução de canais de condutância, o aparato experimental desenvolvido gera nanocontatos de forma bastante simples e eficiente, onde é possível medir a quantização da condutância com a justaposição perpendicular de fios metálicos macroscópicos. Além disso, como é utilizado materiais de baixo custo financeiro para sua construção, torna-se mais viável a aquisição e utilização deste aparato nas disciplinas de laboratório didático de Física.

7.3 CURVAS MEDIDAS

Nas curvas de condutância (relacionadas a tensão de saída), foi possível observar patamares que correspondem a múltiplos inteiros de G_0 , como as da **Fig. 30** e **Fig. 31** para o cobre; e como as da **Fig. 33**, para o tungstênio. As curvas com patamares decrescentes com o tempo correspondem a construção de canais de condutância, isto é, ao aumento do contato entre os fios metálicos. Já as curvas com patamares crescentes correspondem a desconstrução de canais de condutância, isto é, ao afastamento entre fios.

Pode-se observar também que nas curvas apresentadas que os patamares não são sequenciais. Isso pode ser explicado pelo tempo de aquisição das medidas do osciloscópio. Ao receber um sinal (devido ao contato entre os fios), um patamar é apresentado na tela, no entanto, como o contato ocorre em uma alta frequência (não

tivemos controle direto sobre), não dá tempo do osciloscópio receber o sinal relativo ao contato do canal subsequente, apresentando assim os patamares não sequenciais. Mas, apesar disso, os patamares são espaçados de forma coerente com o esperado teoricamente. Por exemplo, há um espaçamento maior entre os canais 17 e 7; e um espaçamento menor entre os canais 3 e 4, no primeiro gráfico da **Fig. 30**. Pode-se perceber também patamares unitários.

Nas curvas analisadas, as vezes se tornava difícil perceber patamares bem regulares, devido as oscilações causadas pelo tempo de resposta do amplificador operacional TL071.

Notou-se que os patamares apresentados estão bem rentes as linhas de referências horizontais (caracterizada por múltiplos inteiros de G_0), o que implica bons resultados para a quantização da condutância, que se assemelha aos patamares da **Fig. 17**. No entanto, alguns saltos não são tão abruptos, o que possivelmente tem a ver com as oscilações (do tipo senoidal) devido ao *setting time* do amplificador. Além disso, é possível notar patamares mais largos que outros, o que pode ser explicado devido a degenerescência na energia do sistema, o que permite o alargamento dos patamares, fazendo com que outros elétrons (com estados quânticos diferentes, mas com mesma energia transversal), ocupem os níveis de energia transversais permitidos ao longo do nanocontato. Outra possível explicação é que, como não se tem o controle da dinâmica de variação da seção transversal, nem o tempo em que os fios ficam em contato, nem do tempo de aquisição das medidas, há contatos que passam mais tempo que outros durante as medidas.

Como não há controle da dinâmica da seção transversal dos nanocontatos formado pelos fios, ocorre curvas diferentes em cada medida feita e por isso os perfis das curvas de condutância não são idênticos. A solução geralmente empregada na literatura (RODRIGUES; UGARTE, 1999) é a utilização de histogramas globais, como os apresentados nas **Fig. 32** e **Fig. 34**. Com estes histogramas podemos representar o comportamento geral da condutância. Do ponto de vista estrutural, pode-se considerar que a utilização desses histogramas como uma média do caminho adotado para a reestruturação do fio, que reflete na condutância (RODRIGUES; UGARTE, 1999). A **Fig. 32** mostra o histograma global obtido para o cobre, num total de 525 patamares analisados, onde pode-se nitidamente notar que há grandes concentrações (formando picos) em $G \cong 2G_0$, $G \cong 3G_0$, $G \cong 4G_0$, $G \cong 5G_0$, $G \cong 6G_0$, $G \cong 7G_0$, quando comparados aos outros valores observados. Não se observou pico

acentuado em $G \cong 1G_0$, devido a maleabilidade do fio de cobre utilizado, o que o tornou com bastante dobras e possivelmente dificultou a obtenção do canal 1, pois o diâmetro da área de contato entre os fios foi provavelmente maior que a área relativa a este canal. Analogamente, pode-se observar as concentrações da condutância no histograma global para o tungstênio, **Fig. 34**, num total de 526 patamares analisados. Neste, notamos picos acentuados em $G \cong 1G_0$, $G \cong 2G_0$ e $G \cong 3G_0$, o que mostra que com o tungstênio¹⁶ é bem mais fácil conseguir os primeiros canais de condutância, provavelmente pelo fato dele ser menos maleável que o cobre, ou mesmo pela forma como justapomos os fios. Este perfil apresentando picos próximos aos múltiplos inteiros de G_0 é considerado a verificação da quantização da condutância (RODRIGUES; UGARTE, 1999).

No modelo teórico usado e discutido de forma detalhada no desenvolvimento teórico, os saltos abruptos no valor da condutância são provocados pela ocupação de modos de transmissão dos elétrons através do nanocontato, cujo o número varia devido à mudança na seção transversal (RODRIGUES; UGARTE, 1999). Há assim dois fenômenos que ocorrem simultaneamente: rearranjos estruturais (mudança da seção transversal); e propriedades eletrônicas (guia de ondas – comportamento ondulatório dos elétrons). Mas, como esses dois fenômenos ocorrem simultaneamente no experimento, torna-se difícil descobrir qual o responsável pelos patamares e saltos observados na condutância (RODRIGUES; UGARTE, 1999). Contudo as mudanças próximas aos valores esperados da condutância demonstram um claro comportamento quântico.

Experimentalmente (utilizando a técnica *Break Junction*) já foi verificado que a interpretação da quantização da condutância pode ser explicada devido a propriedades eletrônicas. Certos formatos da seção transversal permitem que alguns níveis sejam degenerados. Quando a energia de um desses níveis se torna maior ou menor que a energia de Fermi deve-se observar patamares na condutância, isto é, a condutância dada por múltiplos inteiros de G_0 . (RODRIGUES; UGARTE, 1999)

Pode-se observar nos histogramas que nem todos os valores estão exatamente concentrados nos respectivos canais, aparecendo em posições intermediárias, cujo

¹⁶ Para obtenção dos primeiros canais de condutância ambos os metais possuem dimensões de nanocontato bem próximas, como apresentado em (4.108). Então, provavelmente a facilidade de obter os primeiros canais para o tungstênio não pode ter sido pelo motivo das dimensões do nanocontato ser muito maior que as dimensões do nanocontato dos fios de cobre.

perfil é semelhante aos múltiplos inteiros de G_0 . Resultados como estes já foram obtidos em outros experimentos de condutância. A justificativa para esses patamares intermediários é atribuída a impurezas (RODRIGUES, 1999; RODRIGUES; UGARTE, 1999; CHEN et al., 2009; CHU; SORBELLO, 1989). Todavia não ficam claros os critérios adotados para considerar uma determinada medida como influenciada por impurezas (RODRIGUES, 1999). Entretanto, previsões teóricas (RODRIGUES, 1999; CHEN et al., 2009; CHU; SORBELLO, 1989) apontam que, a depender do tamanho, essas impurezas destroem a quantização da condutância e assim não poderiam gerar patamares deslocados múltiplos de G_0 .

8 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A partir do formalismo de Landauer conclui-se que, para um transporte quântico balístico e com seção transversal com diâmetro da ordem de nanômetro, a condutância é quantizada em múltiplos inteiros de G_0 . A partir disso, com o experimento proposto foi possível obter a constante de Planck com boa aproximação e mostrar o caráter quântico da condutância elétrica em nanocondutores metálicos de cobre e tungstênio por meio de análises de curvas de condutância e histogramas globais e constatar boa concordância dos resultados experimentais com o que é esperado teoricamente.

Partindo da Teoria da Aprendizagem Significativa de Ausubel, pode-se dizer que atividades experimentais podem ser um material potencialmente significativo, saindo do mecanicismo no qual as atividades são geralmente propostas. Baseado nisso, o roteiro desenvolvido traz essa característica, de ser potencialmente significativo, fazendo com que o aluno não apenas realize o experimento como uma “receita de bolo”, mas que o mesmo também faça questionamentos acerca do experimento, discuta com os colegas e faça comparações entre o que foi visto em sala de aula com as atividades práticas realizadas, além de ir em busca para resposta de certas questões propostas. Nesse contexto, o professor passa a ser mediador do conhecimento, mas, simultaneamente, permitindo ao aluno certa autonomia científica, considerando os conhecimentos prévios que ele possui.

No que se refere ao experimento, a montagem experimental consistiu basicamente na construção de um circuito elétrico amplificador, onde os materiais necessários são de fácil aquisição e baixo custo (totalizando R\$ 136,00 gastos), mas com resultados análogos aos obtidos com técnicas sofisticadas e de alto custo de implementação e operação, possibilitando sua utilização em laboratórios didáticos de Física.

Por fim, destaco um resultado interessante, e já observado em outros experimentos que envolveram análises da condutância a nível quântico, que é o aparecimento de alguns patamares em níveis intermediários, isto é, múltiplos não inteiros de G_0 , o que estimula novos experimentos e estudos sobre as propriedades de sistemas nanométricos.

9 ATIVIDADES PARALELAS DESENVOLVIDAS

Para o estudo da condutância foi necessário, como já apresentado, a construção de um circuito elétrico amplificador. Este circuito foi montado na eletrônica no Departamento de Física da UFPE-RECIFE. Na montagem do circuito elétrico (em uma placa de cobre-circuito impresso) pude aprender bastante coisa. Abaixo segue algumas fotos.

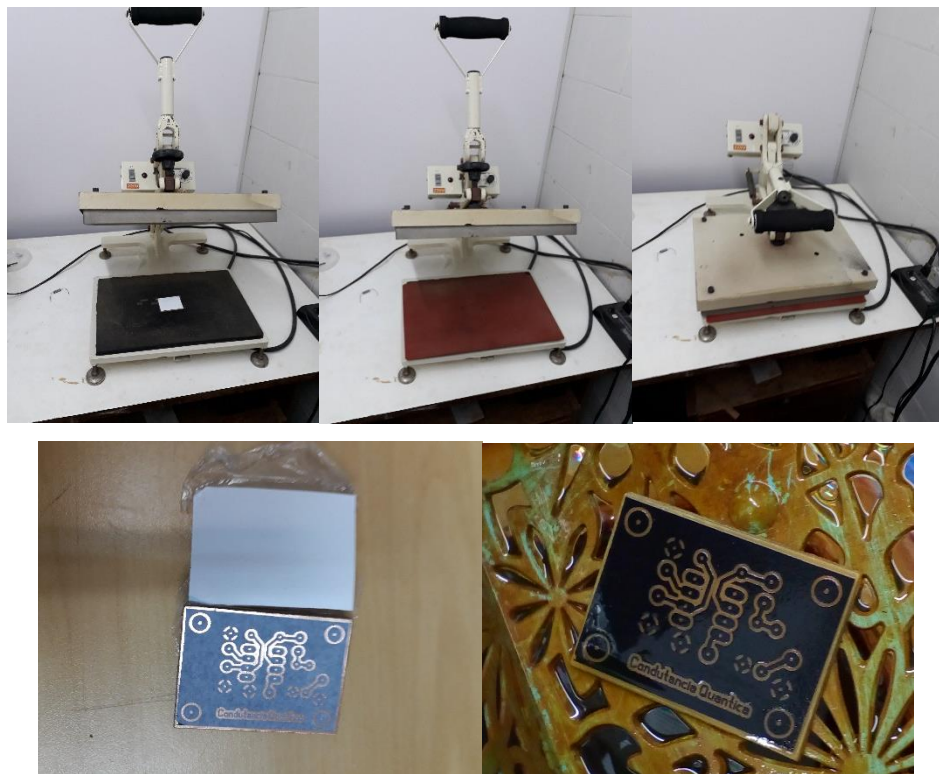


Figura 36 - Montagem do circuito elétrico impresso.

É válido destacar também a leitura de vários artigos envolvendo assuntos inerente a pesquisa.

REFERÊNCIAS

AGRAÏT, N.; YEYATI, A. L.; RUITENBEECK, J. M. V. Quantum properties of atomic-sized conductors. **Physics Reports**, v. 377, p. 81-279, abr. 2003.

ALCACÉR, L. **Física do Estado Sólido**. 2013. Disponível em: <http://www.lx.it.pt/~alcacer/FisicaEstadoSolido_v5.pdf> Acesso em: 02 jun. 2018.

ALVES, V. F. **A inserção de atividades experimentais no ensino de Física em nível médio: em busca de melhores resultados de aprendizagem**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) – Instituto de Física, Universidade Federal de Brasília. Brasília, p. 130. 2006.

ARAÚJO, M. S. T.; ABIB, M. L. V. S. Atividades Experimentais no Ensino de Física: Diferentes Enfoques, Diferentes Finalidades. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 25, n. 2, p. 176-194, jun. 2003.

ARRAS, K. O. An Introduction To Error Propagation: Derivation, Meaning And Examples Of Equation $C_Y = F_X C_X F_X^T$. **ETHzürich**, Zürich, p. 1-19, set. 1998.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do Estado Sólido**. São Paulo: Cengage Learning, 2011.

AZEVEDO, M. C. P. S. Ensino Por Investigação: Problematizando as Atividades em Sala de Aula. In: CARVALHO, A. M. P. **Ensino de Ciências: unindo a pesquisa e a prática**. São Paulo: THOMSON, 2004.

BALDO, M. **Introduction to Nanoelectronics**. 2011. Disponível em: <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-701-introduction-to-nanoelectronics-spring-2010/readings/MIT6_701S10_notes.pdf> Acesso em: 04 fev. 2019.

BARRETO, J. **Análise do Comportamento da Condutividade Elétrica de Sólidos Em Função da Temperatura**. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) – Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá. Maringá, p. 40. 2015.

BASSALO, J. M. F. A Crônica da Física do Estado Sólido II: Teoria dos Metais, **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 15, nº s (1 a 4), p. 139-152, 1993.

BOPP, T. R. **Professor Mediador: gerando interesse no aprendizado de Botânica em estudantes do Ensino Médio**. Trabalho de Conclusão de Curso (Curso de Ciências Biológicas) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Rio Grande do Sul, p. 65. 2013.

BORRAGINI, E. F. Estratégias Experimentais para a Evolução Conceitual em Ensino de Física. **Caderno pedagógico**, Lajeado, v. 5, n. 2, p. 131-148, 2008.

BROCKS, G. **Electron Transport At The Nanoscale**. 2005. Disponível em: <<http://www.acmm.nl/molSim/han/2005/lnotes.pdf>> Acesso em: 07 jan. 2019.

CHEN, J.C. et al. Effects of impurity scattering on the quantized conductance of a quasi-one-dimensional quantum wire. **Applied Physics Letters**, v. 94, p. 012101 – 012105, jan. 2009.

CHU, C.S., SORBELLO, R.S. Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels. **Physical Review B**, v. 40, p. 5941 set. 1989.

COSTA- KRÄMER, J. L. et al. Nanowire formation in macroscopic metallic contacts: quantum mechanical conductance tapping a table top. **Surface Science**, v. 342, p. L1144-L1149, nov. 1995.

DAMYANOV, D. S. et al. Planck's constant measurement by Landauer quantization for students laboratories. **European Journal of Physics**, v. 36, n. 5, p. 1-20, ag. 2015.

DAVIDSON, A. **An Examination of Quantized Conductance in Nanowires**. 2007. Disponível em: < <https://advlabs.aapt.org/items/detail.cfm?ID=11237> > Acesso em: 27 dez. 2018.

EISBERG, R. M.; RESNICK, R. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**. 9. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1979.

FIGUEIREDO, J. **Notas de Física do Estado Sólido**. 2002-2006. Disponível em: <<http://w3.ualg.pt/~jlongras/aulas/fes.pdf>> Acesso em 02 jun. 2018.

GALLIANO, A. G. **O Método Científico: Teoria e Prática**. São Paulo: Mosaico Ltda., 1979.

GRIFFITHS, D. **Mecânica Quântica**. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2011.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. **Fundamentos da Física 3: Eletromagnetismo**. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1984.

KITTEL, C. **Física do Estado Sólido**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

LEÃO, L. H. V. **Física Experimental 1- Erros e Medidas II**. [201?]. Disponível em: <<https://sites.google.com/site/professorluisleao/disciplinas/fisica-experimental-1-1>> Acesso em: 21 jan. 2019.

LEIRIA, T. F.; MATARUCO, S. M. C. O Papel das Atividades Experimentais no Processo de Ensino-Aprendizagem de Física. In: EDUCERE, Congresso Nacional de Educação, 12, 2015, Curitiba. **Anais...** Curitiba: PUCPR, 2015.

LEMELL, C, et al. Simulation of attosecond streaking of electrons emitted from a tungsten surface. **Physical Review A**, v. 79, p. 062901, jun. 2009.

MOREIRA, M. A; PALMERO, M. L. R.; CABALLERO, M. C. **Actas del Encuentro Internacional sobre el aprendizaje significativo**. Burgos: Universidad de Burgos, 1997.

MOREIRA, M. A. **Aprendizagem Significativa**. Brasília: Universidade de Brasília, 1999.

MOREIRA, M. A. ¿Al Final, Qué Es Aprendizaje Significativo? **Qurrriculum**, Santa Cruz de Tenerife, n. 25, p. 29-56, mar. 2012.

OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. **Introdução a Física do Estado Sólido**. 1. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.

PAREDES, M. J. L. **Efeitos Estruturais na Condutância Quântica e na Deformação Mecânica de Nanofios Metálicos**. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas. São Paulo, p. 179. 2010.

PÉREZ, C. A. S. O Modelo do Elétron Livre de Drude Completa 100 Anos. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, Florianópolis, v.17, n.3, p.348-359, dez. 2000.

RECKTENWALD, G. **Uncertainty Estimation and Calculation**. 2006. Disponível em: <<http://web.cecs.pdx.edu/~gerry/class/ME449/>>. Acesso em 04 jan. 2019.

RODRIGUES, V. **Efeitos Quânticos no Transporte Elétrico em Nanoestruturas Metálicas**. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas. São Paulo, p. 87. 1999.

RODRIGUES, V.; UGARTE, D.M. Quantização da Condutância: Um Experimento Simples para o Ensino de Física. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, n. 2, p. 264-271, jun. 1999.

SALINAS, S. R. A. **Introdução a Física Estatística**. 2. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.

TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. **Física Moderna**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

TOLLEY, R. et al. Conductance quantization: A laboratory experiment in a senior-level nanoscale science and technology course. **American Journal of Physics**, v. 81, n.1, p. 14-19, jan. 2013.

APÊNDICE A

FOTOS DO EXPERIMENTO



Figura 37 - Fotos do experimento. Podemos ver a caixa do circuito elétrico, a caixa onde os fios ficavam oscilando junto com o micromotor. A última foto é a montagem experimental completa.

APENDICE B

PROGRAMA PARA CONTROLE DO PWM

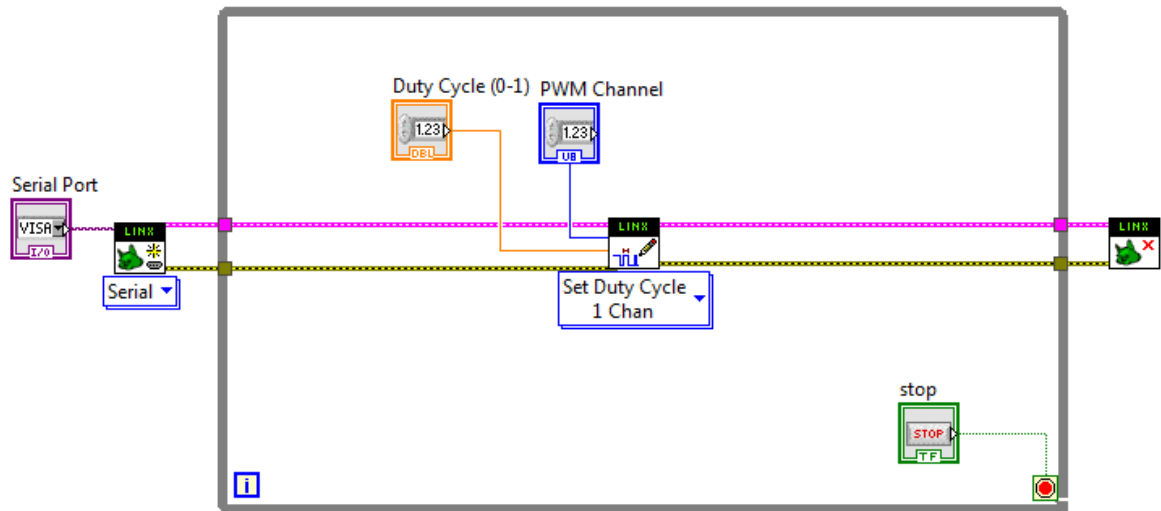


Figura 38 - Diagrama de Blocos no *software* LabVIEW.

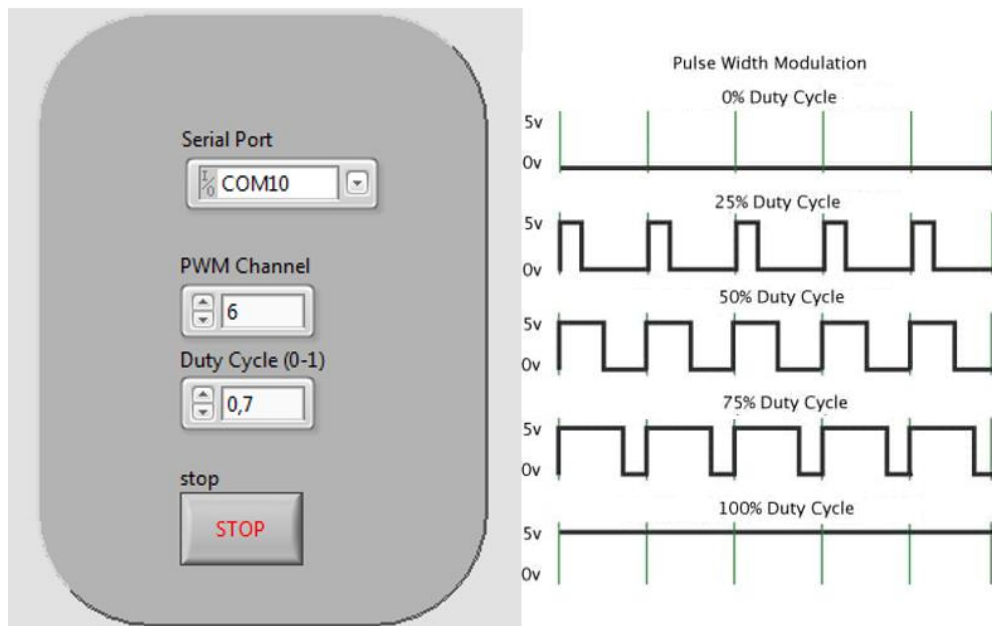


Figura 39 - Painel Frontal do programa e ilustração da tensão de saída usando o PWM. O Duty Cycle pode ser variado de 0 a 1, sendo 1 representando (100%) o valor da tensão de saída máxima, que é 5V.

APÊNDICE C

ROTEIRO EXPERIMENTAL PARA MEDIDA DA QUANTIZAÇÃO DA CONDUTÂNCIA

A ideia deste roteiro é que o professor siga os passos da Introdução Teórica, onde são apresentados alguns conceitos que provavelmente os alunos já conhecem, como a Lei de Ohm e sistemas quânticos básicos, para assim poder introduzir como a condutância elétrica pode ser expressa em fios com dimensões nanométricas.

Introdução Teórica

Como já conhecido, o transporte de corrente elétrica pode ser descrito pela Lei de Ohm que relaciona a diferença de potencial ΔV aplicado entre os extremos de um condutor, com a corrente e a resistência, por meio de $R = \Delta V/I$, onde A é seção transversal do fio, L o comprimento. A resistência também pode ser definida por meio de parâmetros geométricos do sistema, $R = \rho \frac{L}{A}$, sendo ρ a resistividade, característica do material.

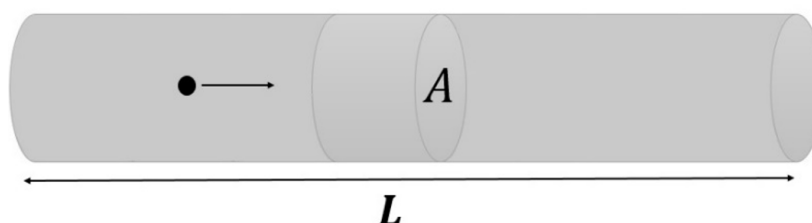


Figura 1 - Elétron em um fio condutor de seção transversal uniforme A e comprimento L .

Se considerarmos um fio metálico de seção transversal uniforme, com área A , e comprimento L , como o apresentado na **Fig. 1**, intuitivamente esperamos que a condutância cresça com o aumento da seção transversal do condutor e decresça com o aumento do seu comprimento. Estas relações são verificadas experimentalmente e definem uma grandeza física chamada de condutância, que pode ser expressa matematicamente da seguinte maneira^[1,2]:

$$G \equiv \frac{I}{\Delta V} = \frac{\sigma A}{L},$$

1

com $\sigma = 1/\rho$. Então, podemos notar a dependência direta da condutância com propriedades geométricas do condutor, como área e comprimento.

Da interpretação dada para a Lei de Ohm, a relação entre corrente e tensão tem origem das colisões dos elétrons que transportam carga no condutor com os íons da rede, no caso do modelo de Drude; ou no espalhamento sofrido por esses elétrons, no caso de modelos quânticos de condução eletrônica^[2].

A Lei de Ohm (que define a condutância elétrica) funciona muito bem para fios macroscópicos, mas o que esperar ao diminuir suas dimensões para valores da ordem do nanômetro? Será que a condutância ainda irá variar continuamente?

Antes de responder esta pergunta, é interessante relembrar algumas características de sistemas quânticos. Para isso, vamos nos ater a um sistema simples de um elétron confinado em um fio unidimensional.

Resolver problemas em mecânica quântica gira em torno de encontrar o estado do sistema, que pode ser caracterizado pela função de onda quântica. No problema em questão, encontrando a função de onda e utilizando as condições de contorno, obtemos que a energia do sistema pode ser escrita como $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \equiv n^2 E_0$, onde podemos perceber que o sistema não varia sua energia continuamente, mas em múltiplos inteiros de um quantum, E_0 . Além disso, note que a medida que L aumenta, os níveis de energia se tornam cada vez mais próximos, tendendo ao caso onde a energia varia continuamente. Entretanto, para L suficientemente pequeno, os níveis ficam bem espaçados. Analogamente, a condutância elétrica varia em níveis (ou modos) que dependem de múltiplos inteiros de um quantum. Isso se torna válido para certas dimensões do fio. Assim, tratando o elétron como uma onda, a partir do formalismo de Landauer, a condutância G é escrita como^[1,2,3,4,5]

$$G = G_0 \sum_{n=1} |T_n|^2,$$

2

onde $\frac{2e^2}{h} \equiv G_0$ é o quantum de condutância, $|T_n|^2$ representa a probabilidade de transmissão e n o número de estados transversais.

Podemos estudar a condutância fazendo uma constrição em um fio, como representado na **Figura 2**. Se considerarmos A da ordem de nanômetros e o comprimento da constrição for tal que $L < l$, sendo l o livre caminho médio do elétron, então a probabilidade de transmissão é aproximadamente 1, visto que neste limite não haverá espalhamento dos elétrons, e assim a condutância se torna^[1,2,3,4,5]

$$G_{bal} = G_0 \sum_{n=1}^{\infty} 1 = nG_0, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad 3$$

n é o número de modos transversais suportados pelo fio; G_{bal} é chamada de condutância balística. Note que n é um número inteiro.

Em um fio real sempre contém impurezas e imperfeições (defeitos de rede, limites de grão, átomos de impureza, etc.) e a dispersão desses defeitos domina a condutância. Mas, em fios finos e pequenos (limite quântico) esses feitos são amenizados e podemos medir a quantização da condutância.^[3]

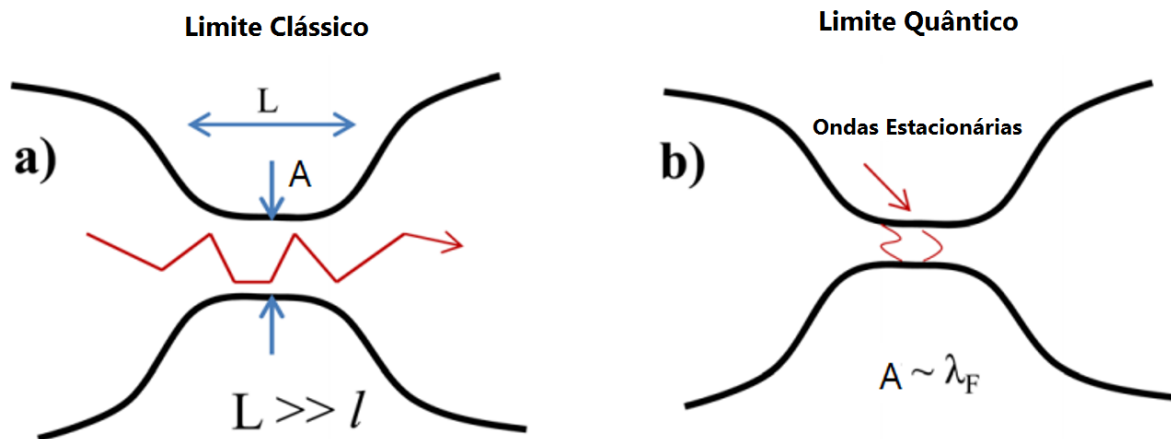


Figura 2 - Constrição em um fio. (a) Limite clássico, onde A não é da ordem de nanômetro e L é muito maior que o livre caminho médio dos elétrons na superfície de Fermi. (b) Limite quântico, onde a área é da ordem do comprimento de onda de Fermi, e L é menor que o livre caminho médio.^[6]

É possível criar nanocontatos utilizando dois fios metálicos perpendicularmente justapostos, formando contatos de dimensões nanométricas. Nessas condições, a condutância passa a variar não mais depende de propriedades geométricas do material, mas sim em patamares e saltos abruptos múltiplos de G_0 . A observação

desse fenômeno pode ser feita utilizando uma montagem experimental relativamente simples, necessitando apenas a construção de um circuito elétrico amplificador (que será fornecido previamente). Assim, quando os fios são postos perpendicularmente em contato surge uma resistência elétrica que, a depender das dimensões do contato, está relacionada diretamente ao quantum de condutância. A tensão que surge entre esse resistor (devido ao contato entre os fios) pode ser amplificada utilizando um amplificador operacional e assim medida por meio de um osciloscópio digital. O circuito elétrico está ilustrado na **Fig. 3**.

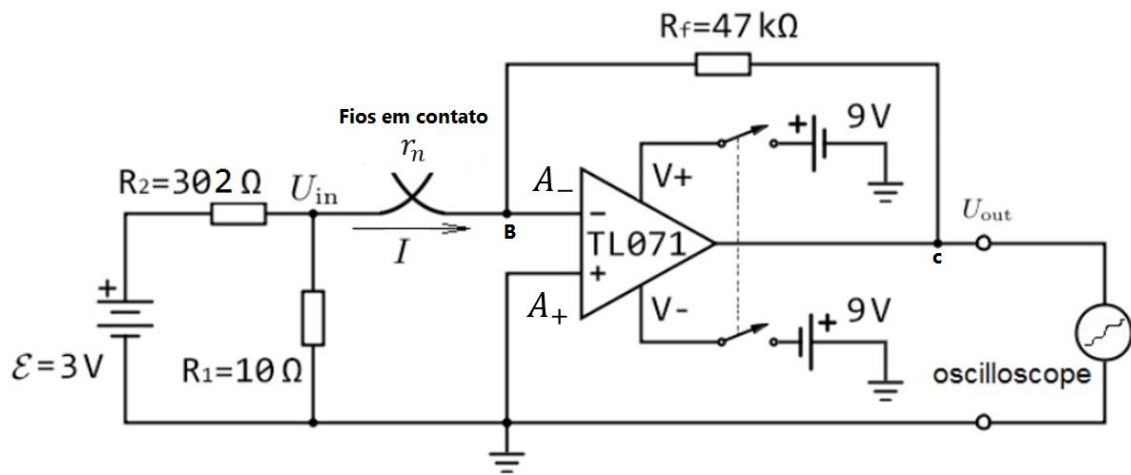


Figura 3 - Circuito elétrico amplificador de sinal para medida da condutância quântica. ^[8]

Quando os fios estão em contato formam um quantum de condutância e eles podem ser apresentados como um resistor r_n . Nesse caso, a **Fig. 3** mostra o esquema de um amplificador inversor, que mede a tensão de entrada U_{in} do divisor de tensão formado por R_1 e R_2 . Para os valores de $R_1 = 10\ \Omega$ e $R_2 = 302\ \Omega$ a queda de tensão devido ao divisor é de aproximadamente $0,096\ V$. O valor de R_1 e R_2 é escolhido de forma que a tensão de entrada do divisor U_{in} seja menor que a tensão máxima de saída do amplificador inversor (que é, no nosso caso, $9V$ que representa a tensão de saturação), dividida pelo seu ganho \mathcal{G}_n , ou seja, $\frac{3R_1}{R_1 + R_2} < \frac{9}{\mathcal{G}_n}$, onde o ganho pode ser expresso como

$$\mathcal{G}_n = -\frac{R_f}{r_n} = \frac{U_{out}}{U_{int}}.$$

Podemos calcular o valor de r_n e assim saber o ganho para cada valor de n . Sabemos, da primeira Lei de Ohm, que a tensão elétrica $U = RI$ e a condutância elétrica é $G = I/U$. Logo, concluímos que $R = 1/G$. Portanto, a resistência r_n pode ser escrita como

$$r_n = \frac{1}{G}, \quad 5$$

Mas, como a condutância elétrica é $G = \frac{2e^2}{h}n$. Assim, substituindo na expressão (4), usando (3) e isolando h , obtemos^[5]

$$h = -2e^2 R_f n \frac{U_{in}}{U_{out}}. \quad 6$$

Assim, para medir a constante de Planck basta conhecer a tensão de saída e também qual o valor de n relativo aquela tensão, que pode ser medido fazendo $G_n = U_{out}/U_{int}$ e comparando com o valor para do ganho para cada r_n , que pode ser encontrado teoricamente usando a equação (4).

Roteiro do Experimento

1. Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é a construção de uma montagem experimental que permita a criação de contatos metálicos de dimensões nanométricas, onde fenômenos quânticos tornam-se dominantes. Em particular, observar a quantização da condutância utilizando fios metálicos justapostos, formando nanocontatos da ordem do comprimento de onda dos elétrons na superfície de Fermi.

2. Material Utilizado

Circuito elétrico amplificador para medida de condutância, multímetro, três cabos BNC, Arduíno, micromotor vibracall, fita adesiva para fixar o micromotor, fios para

fazer as ligações, caixa metálica para amenizar os ruídos, pedaços de fios metálicos bem finos, ferro de solda e osciloscópio digital.

3. Procedimento Experimental – Medida das Curvas de Condutância

Primeiramente faça a checagem da tensão de saída no circuito elétrico e verifique se ela está em torno de $0,096V$. Conecte uma extremidade do cabo BNC na saída do circuito e a outra extremidade conecte ao osciloscópio. Deixe em $1V$ ou $2V$ por divisão e a escala de tempo com $5\mu s$. Conecte os outros dois cabos BNC no circuito elétrico e encoste as pontas dos cabos. No osciloscópio deverá aparecer uma tensão negativa de aproximadamente $-9V$. Caso isso não ocorra, verifique se há algum problema no circuito ou no osciloscópio. Feito isso, solde os pedaços de algum tipo de fio metálico (pode ser de cobre) nas extremidades dos cabos BNC, de acordo com a **Fig. 4**.

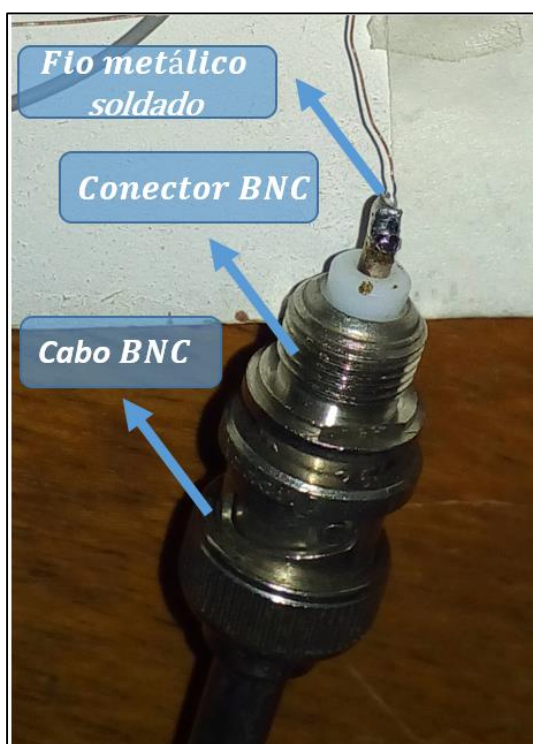


Figura 4 - Fio metálico soldado em um conector BNC, onde o mesmo está conectado ao cabo BNC.

Após ter feitos as devidas verificações, com os dois cabos BNC conectados ao circuito e o outro cabo BNC conectado ao osciloscópio e com a função *single* ligada, podemos começar as medidas:

1. Manualmente, encoste e desencoste os fios metálicos de forma perpendicular, sem fazer muita pressão e verifique os patamares na tela do osciloscópio. É preciso ir fazendo esse processo várias vezes, até um número considerável de medidas. Faça isso em torno de 200 vezes e salve cada medida em um *pendrive* para posterior análise.

2. Repita o processo utilizando agora o micromotor vibracall. Para tal, fixe com fita adesiva o micromotor em uma superfície rígida não condutora e ligue o terminal positivo na porta PWM do Arduino e o outro terminal na porta GND. Com o motor fixado, utilize um programa para controlar a função PWM e deixe o *Duty cycle* em 70%. Com fita adesiva, fixe um dos pedaços do fio metálico (de preferência o pedaço menor) em cima do micromotor. Após isso, com cuidado para não amassar os fios, deixe o outro fio levemente encostado ao fio fixado no micromotor, veja a **Fig. 5**. Vá pressionando sequencialmente o botão *single* e pare de pressionar quando observar patamares na tela do osciloscópio. Salve as medidas escolhidas para posterior análise.

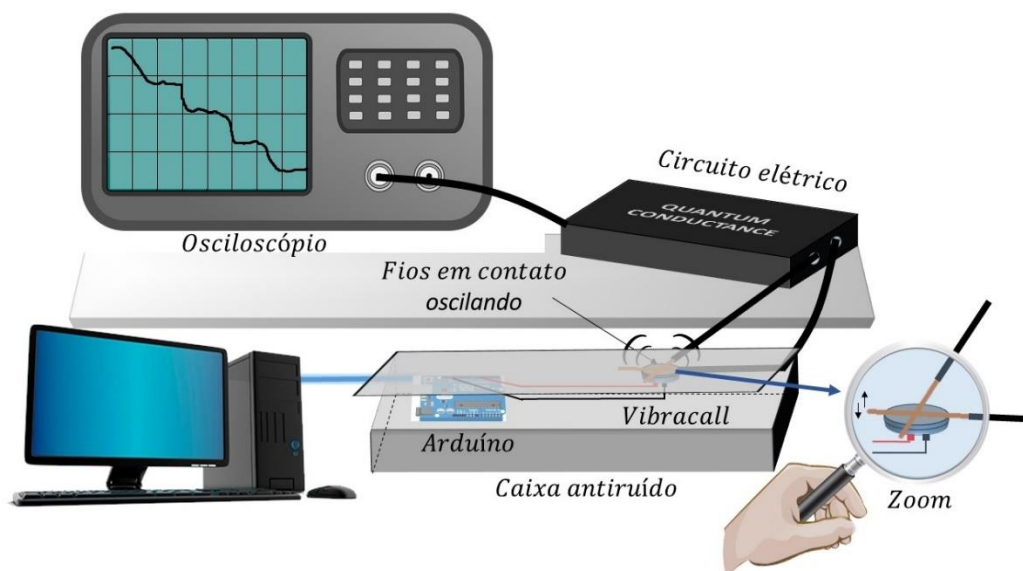


Figura 5 - Setup experimental para medida de condutância quântica.

3. Determine a que canal pertence cada patamar observado utilizando as relações (2), (3) e (4). Crie linhas horizontais que servirão de referência para cada canal.

4. Com as medidas salvas, abra cada arquivo em um *software*, como o Origin, por exemplo. Verifique em quais dos métodos se obteve melhor os primeiros 3 canais de condutância e justifique o possível motivo para isso. Quais as condições para que a condutância tenda ao limite clássico? Além disso, as quantidades de medidas realizadas foram suficientes para as análises? Se não, a que você atribui este fato?

5. Faça uma média em cada patamar e salve os valores em uma tabela. Com isso, monte um histograma e deixe o *bin* em 0.1. Fixe linhas verticais que representem a tensão relativa a cada canal. Os picos observados no histograma estão concentrados em nos respectivos canais, há picos intermediários. Se sim, a que você atribuiria esses picos intermediários?

6. Houve mudanças abruptas nas curvas de condutância ou foram passagens mais suaves entre os patamares? Como você explicaria isso?

7. Do conjunto de todas, selecione as curvas relativas aos canais 1, 2, 3, 4 e 5. Selecione apenas os patamares que estejam mais rentes as linhas horizontais, desconsidere os intermediários. Faça uma média do total de medidas para cada canal e salve em uma tabela, tanto o valor médio quanto o desvio padrão.

8. Calcule a incerteza para a tensão de entrada U_{in} utilizando o seguinte: considerando uma medida f , onde $f = f(a_1, a_2, a_3, a_n \dots)$, e Δa_n é a incerteza de a_n , a incerteza de f , Δf , é dada por^[7,8]

$$\Delta f = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial a_1}\right)^2 (\Delta a_1)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a_2}\right)^2 (\Delta a_2)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a_3}\right)^2 (\Delta a_3)^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial a_n}\right)^2 (\Delta a_n)^2}, \quad (3.5.7)$$

e se a_n for uma medida estatística, então sua incerteza é dada por $\Delta a_n =$

$\sqrt{\sigma_{\bar{a}_n}^2 + \Delta a_{n,instru.}^2}$, onde $\Delta a_{n,instru.}$ é a incerteza instrumental.

9. Calcule a constante de Planck utilizando a equação (5) bem como a incerteza associada, utilizando (6). Salve os valores em uma tabela e calcule o erro relativo.

REFERÊNCIAS

[1] RODRIGUES, V.; UGARTE, D.M. Quantização da Condutância: Um Experimento Simples para o Ensino de Física. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, n. 2, p. 264-271, jun. 1999.

[2] RODRIGUES, V. **Efeitos Quânticos no Transporte Elétrico em Nanoestruturas Metálicas**. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas. São Paulo, p. 87. 1999.

[3] BROCKS, G. **Electron Transport At The Nanoscale**. 2005. Disponível em: <<http://www.acmm.nl/molim/han/2005/lnotes.pdf>> Acesso em: 07 jan. 2019.

[4] AGRAÏT, N.; YEYATI, A. L.; RUITENBEECK, J. M. V. Quantum properties of atomic-sized conductors. **Physics Reports**, v. 377, p. 81-279, abr. 2003.

[5] DAMYANOV, D. S. et al. Planck's constant measurement by Landauer quantization for students laboratories. **European Journal of Physics**, v. 36, n. 5, p. 1-20, ag. 2015.

[6] TOLLEY, R. et al. Conductance quantization: A laboratory experiment in a senior-level nanoscale science and technology course. **American Journal of Physics**, v. 81, n.1, p. 14-19, jan. 2013.

[7] ARRAS, K. O. An Introduction To Error Propagation: Derivation, Meaning And Examples Of Equation $C_Y = F_X C_X F_X^T$. **ETH Zürich**, Zürich, p. 1-19, set. 1998.
ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do Estado Sólido**. São Paulo: Cengage Learning, 2011.

[8] RECKTENWALD, G. **Uncertainty Estimation and Calculation**. 2006. Disponível em: <<http://web.cecs.pdx.edu/~germy/class/ME449/>>. Acesso em 04 jan. 2019.