

Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará – UNIFESSPA

Faculdade de Física

Instituto de Ciências Exatas

DANILA LIMA MELO

Simulação do Efeito Aharonov-Bohm

Marabá-PA

2018, Março

DANILA LIMA MELO

Simulação do Efeito Aharonov-Bohm

Trabalho apresentado à Faculdade de Física
como requisito parcial para a obtenção do
grau de Licenciada em Física pela Universi-
dade Federal do Sul e Sudeste do Pará.

Orientador: Prof. Dr. Tiago Carvalho Martins

Marabá-PA
2018, Março

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Biblioteca II da UNIFESSPA. CAMAR, Marabá, PA

Mello, Danila Lima

Simulação do Efeito Aharonov-Bohm / Danila Lima Melo;
orientador, Tiago Carvalho Martins. — 2018.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade
Federal do Sul e Sudeste do Pará, Campus Universitário de
Marabá, Instituto de Ciências Exatas, Faculdade de Física, Curso
de Física, Marabá, 2018.

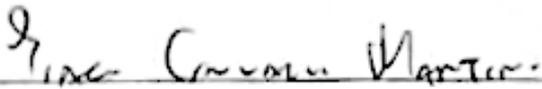
1. Física – Estudos e ensino. 2. Campos eletromagnéticos. 3.
Modelos matemáticos. I. Martins, Tiago Carvalho, orient. II.
Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará. III. Título.

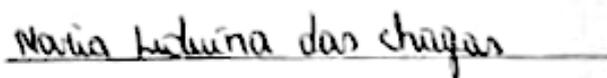
CDD: 22. ed.: 530.07

SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DO SUL E SUDESTE DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
FACULDADE DE FÍSICA

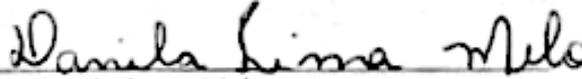
ATA DA APRESENTAÇÃO E DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE
CURSO - TCC

ATA DA SESSÃO DE APRESENTAÇÃO E DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO PARA CONCESSÃO DE GRAU DE LICENCIADO PLENO EM FÍSICA, REALIZADA ÀS 18:00 HORAS DO DIA 12 DE MARÇO DE 2018, NA SALA 12 DO PRÉDIO DA FÍSICA, CAMPUS II, INTITULADA: "SIMULAÇÃO DO EFEITO AHARONOV-BOHM". FOI APRESENTADA DURANTE 30 MINUTOS PELA DISCENTE DANILA LIMA MELO, MATRÍCULA 201340105020 DIANTE DA BANCA EXAMINADORA APROVADA PELA FACULDADE DE FÍSICA DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO SUL E SUDESTE DO PARÁ, ASSIM CONSTITUÍDA: TIAGO CARVALHO MARTINS (ORIENTADOR - UNIFESSPA), MARIA LIDUINA DAS CHAGAS, JORGE EVERALDO DE OLIVEIRA. EM SEGUIDA, O CANDIDATO FOI SUBMETIDO À ARGUIÇÃO, TENDO DEMONSTRADO CONHECIMENTOS NO TEMA OBJETO DA PROPOSTA DE TCC, FAVORECENDO À BANCA EXAMINADORA APRESENTAR CONTRIBUIÇÕES PARA O DESENVOLVIMENTO DO TCC E DECIDIR PELO CONCEITO EXCELENTE DO MESMO, E CONCEDER O PRAZO MÁXIMO DE 15 DIAS PARA SEREM EFETUADAS AS MODIFICAÇÕES SUGERIDAS PELA BANCA, SE FOR O CASO, E EM SEGUIDA A MESMA SERÁ ASSINADA POR TODOS OS MEMBROS. PARA CONSTAR FORAM LAVRADOS OS TERMOS DA PRESENTE ATA, QUE LIDA E APROVADA RECEBE A ASSINATURA DOS INTEGRANTES DA BANCA EXAMINADORA E DO CANDIDATO.

PRESIDENTE: 
Prof. Dr. Tiago Carvalho Martins

MEMBROS: 
Prof. Dr. Maria Liduina das Chagas


Prof. Dr. Jorge Everaldo de Oliveira

CANDIDATO(A): 
Danila Lima Melo

Dedico este trabalho ao meu amado filho.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelo dom da vida. Agradeço aos meus pais, meu filho e familiares.

Agradeço a todos os professores, principalmente ao meu orientador, pela paciência e dedicação.

Agradeço aos meus amigos, em especial ao Brendo Vinicius, sempre presente na minha caminhada, incentivando-me a nunca desistir dos meus sonhos.

Agradeço a minha avó, pelo amor e cuidado que me permitiram chegar aqui.

*“O que sabemos é uma gota; o que
ignoramos é um oceano.”
(Isaac Newton)*

Resumo

O efeito Aharonov-Bohm é um fenômeno quântico associado ao deslocamento de fase da função de onda de uma partícula carregada na presença de um potencial vetor \vec{A} , mesmo quando os campos eletromagnéticos são nulos, fornecendo um significado físico para o potencial vetor. No experimento da dupla fenda com elétrons, a presença de um solenóide na região entre as fendas e o anteparo produz um campo magnético confinado ao interior do solenóide e que, portanto, não interage com os elétrons, todavia, devido ao potencial vetor \vec{A} , a fase da função de onda é alterada, e o padrão de interferência, o qual é produzido no anteparo, apresenta um deslocamento. O efeito Aharonov-Bohm é fundamental no desenvolvimento de dispositivos em nanoeletrônica quântica. Ele, por exemplo, pode ser utilizado para produzir oscilações na condutância de anéis quânticos. O objetivo deste trabalho é apresentar uma material introdutório sobre o efeito Aharonov-Bohm e anéis quânticos, assim como, desenvolver um programa para a simulação do efeito Aharonov-Bohm em anéis quânticos. O programa foi desenvolvido em linguagem Python, utilizando o módulo kwant, que é voltado para cálculos numéricos em modelos de ligações fortes com foco em transporte quântico.

Palavras-chaves: Efeito Aharonov-Bohm. Anéis Quânticos. Modelos de Ligações Fortes. Transporte Quântico.

Abstract

The Aharonov-Bohm effect is a quantum phenomenon associated with the phase shift of the wave function of a charged particle in the presence of a potential vector \vec{A} , even when electromagnetic fields are equal to zero. In the electron double-slit experiment, the presence of a solenoid in the region between the slits and detector produces a magnetic field confined within the solenoid and therefore this field not interact with the electrons, however, due to the potential vector \vec{A} , the wave function phase is modified, and the interference pattern is shifted. The Aharonov-Bohm effect is fundamental in the development of devices in quantum nanoelectronics. For example, it can be used to produce oscillations in the conductance of quantum rings. The purpose of this work is to present an introductory text about Aharonov-Bohm effect and quantum rings, as well as to develop a simulation program for the Aharonov-Bohm effect in quantum rings. The program was developed in Python language, using the kwant module, which is focused on numerical calculations in tight-binding models with a focus on quantum transport.

Key-words: Aharonov-Bohm Effect. Quantum Rings. Tight-Binding Models. Quantum Transport.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Experimento da dupla fenda.	24
Figura 2 – Os ângulos do experimento da dupla fenda.	25
Figura 3 – Dois caminhos possíveis, Γ_1 e Γ_2 , para uma partícula que se desloca da fonte até o anteparo.	26
Figura 4 – Caminho fechado Γ para uma partícula que se desloca da fonte até o anteparo passando por uma das fendas e retornando pela outra.	27
Figura 5 – Presença de um solenoide infinito no experimento de dupla fenda.	29
Figura 6 – Experimento de dupla fenda na presença de campo magnético.	31
Figura 7 – Esquema simplificado de um anel quântico, para os dois possíveis números quânticos de momento angular $l = \pm kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0}$	34
Figura 8 – Transmissão em função do fluxo em um anel quântico, apresentando oscilações de Aharonov-Bohm.	35
Figura 9 – Cadeia unidimensional formada por cinco sítios atômicos, com índices i variando de 0 a 4	37
Figura 10 – Rede de Bravais quadrada.	39
Figura 11 – Modelo de ligações fortes (tight binding), em que ε é o elemento no sítio atômico e $-t$ é o elemento de salto entre átomos que são primeiros vizinhos.	41
Figura 12 – Anel de Aharonov-Bohm com raio externo $20a$, raio interno $10a$ e largura do contato $8a$. Os pontos da rede são plotados como pontos e os potenciais de salto não-nulos entre dois pontos são representados como linhas que os conectam.	44
Figura 13 – Condição de contorno torcida associada a um ramo de corte. Fonte: (SANTOS; WANG, 2014)	44
Figura 14 – Ramo de corte utilizado na simulação.	45
Figura 15 – Condutância em unidades de e^2/h em função do fluxo magnético em unidades de h/e para o anel de Aharonov-Bohm mostrado na Figura 12.	46

Sumário

	Introdução	19
0.1	Objetivos	19
0.2	Disposição dos capítulos	20
1	CONCEITOS PRELIMINARES	21
1.1	Experimento da dupla fenda	24
1.2	Diferença de Fase na Presença de um Potencial Vetor	25
1.3	Invariância de Calibre na Mecânica Quântica	27
2	EFEITO AHARONOV-BOHM	29
2.1	Deslocamento do Padrão de Interferência devido à Presença de um Solenóide	29
2.2	Incorporação de Efeitos Macroscópicos ao Efeito Aharonov-Bohm	30
3	ANÉIS QUÂNTICOS	33
3.1	Transmissão em um Anel Aberto	33
4	SIMULAÇÃO DE UM ANEL QUÂNTICO	37
4.1	Representação Matricial do Hamiltoniano	37
4.2	Modelo de Ligações Fortes	38
4.3	Simulação do Efeito Aharonov-Bohm	41
	Conclusão	47
	REFERÊNCIAS	49

Introdução

Sabe-se da física clássica que uma força, denominada força de Lorentz, atua sobre uma partícula carregada quando ela está em movimento num campo eletromagnético. A força de Lorentz é obtida diretamente dos campos elétrico e magnético, e indiretamente dos potenciais escalar elétrico e vetorial magnético. Além disso, há infinitas transformações de calibre possíveis, que associam um número infinito de diferentes potenciais a um mesmo campo eletromagnético. Estes dois últimos fatos fizeram com que o potencial vetor magnético fosse, por muitos anos, considerado apenas uma variável auxiliar desprovida de significado físico, útil no cálculo dos campos.

Em 1959, Yakir Aharonov e David Bohm publicaram o artigo intitulado "Significado dos potenciais eletromagnéticos na teoria quântica" (*Significance of electromagnetic potentials in quantum theory*) (AHARONOV; BOHM, 1959). Nesse artigo, os autores afirmaram que o significado físico do potencial vetor \vec{A} está associado aos efeitos quânticos em uma partícula que cruza uma região em que os campos eletromagnéticos são nulos e, portanto, em que a força de Lorentz também é nula. De acordo com a referência (SAKURAI; NAPOLITANO; DAHMEN, 2013), isto levou alguns físicos a concluir que o potencial vetor \vec{A} , e não o campo magnético \vec{B} , é a grandeza fundamental, embora o desvio nos máximos do padrão de interferência seja função do fluxo magnético Φ_B , e não de \vec{A} ou \vec{B} .

O efeito Aharonov-Bohm é um fenômeno quântico associado ao deslocamento de fase da função de onda de uma partícula carregada na presença de um potencial vetor \vec{A} , mesmo quando os campos eletromagnéticos são nulos, fornecendo um significado físico para o potencial vetor. No experimento da dupla fenda com elétrons, a presença de um solenóide na região entre as fendas e o anteparo produz um campo magnético confinado ao interior do solenóide e que, portanto, não interage com os elétrons, todavia, devido ao potencial vetor \vec{A} , a fase da função de onda é alterada, e o padrão de interferência, o qual é produzido no anteparo, apresenta um deslocamento. O efeito Aharonov-Bohm é fundamental no desenvolvimento de dispositivos em nanoeletrônica quântica. Ele, por exemplo, pode ser utilizado para produzir oscilações na condutância de anéis quânticos.

0.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho é apresentar uma material introdutório sobre o efeito Aharonov-Bohm e anéis quânticos, assim como, desenvolver códigos para simulação do efeito Aharonov-Bohm em anéis quânticos.

Alguns dos objetivos específicos desse trabalho são: desenvolver um material sobre efeito Aharonov-Bohm e anéis quânticos que seja acessível a alunos concluintes do curso de licenciatura em física, desenvolver programas para calcular a condutância em anéis quânticos, apresentando a descrição detalhada dos comandos utilizados nos códigos desenvolvidos em python com o módulo kwant (<https://kwant-project.org/>).

0.2 Disposição dos capítulos

Este trabalho está organizado em introdução, desenvolvimento e conclusão. O desenvolvimento é constituído por quatro capítulos.

No primeiro capítulo são apresentados conceitos preliminares, como a definição de força de Lorentz, transformações de calibre e hamiltoniano não-relativístico de uma partícula carregada em movimento em um potencial eletromagnético. Também é descrito o experimento da dupla fenda, em que elétrons formam um padrão de interferência após difratarem nas fendas. É descrito o fenômeno de deslocamento do padrão de interferência no experimento de dupla fenda na presença de um potencial eletromagnético. É discutida a invariância de calibre na mecânica quântica.

No segundo capítulo, o efeito Aharonov-Bohm é descrito como um fenômeno de interferência que demonstra a influência do potencial eletromagnético sobre a fase da função de onda de uma partícula carregada mesmo em uma região onde os campos eletromagnéticos são nulos. Também é mostrado que o efeito macroscópico de deslocamento do padrão de interferência apresenta uma expressão semelhante ao do efeito Aharonov-Bohm.

No terceiro capítulo é estudada a aparência da fase de Aharonov-Bohm para o caso em que um elétron tem o seu movimento restrito a um caminho circular ao redor de um fluxo magnético. Verifica-se que os elétrons transportados através de anéis quânticos apresentam oscilações de Aharonov-Bohm em suas curvas de condutâncias em função do fluxo.

No quarto capítulo é descrito o modo de obtenção da matriz hamiltoniana pelo método de ligações fortes. O desenvolvimento de um código utilizando o módulo kwant do Python para a simulação do efeito Aharonov-Bohm em anéis quânticos é descrito em detalhes.

1 Conceitos Preliminares

O movimento de uma partícula de carga e é descrito pela Força de Lorentz

$$\vec{F} = e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \times \vec{B} \right), \quad (1.1)$$

onde $\dot{\vec{x}}$ é o vetor velocidade da partícula, \vec{E} é o vetor intensidade de campo elétrico e \vec{B} é o vetor indução magnética.

Dado o potencial Coulombiano $V(\vec{x}, t)$ e o potencial vetor $\vec{A}(\vec{x}, t)$, é possível encontrar os campos:

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (1.2)$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \quad (1.3)$$

Os potenciais V e \vec{A} , que produzem os campos \vec{E} e \vec{B} , não são únicos, e a partir deles é possível obter outros potenciais que produzem os mesmos campos, através de uma transformação de calibre tal que

$$A'_0 = V - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad (1.4)$$

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi. \quad (1.5)$$

Dada uma função arbitrária $\chi = \chi(\vec{x}, t)$, os campos \vec{E} e \vec{B} não são alterados, assim como a força de Lorentz:

$$\begin{aligned} \vec{E}' &= -\nabla A'_0 - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} \\ \vec{E}' &= -\nabla \left(V - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{A} + \nabla \chi) \\ \vec{E}' &= -\nabla V + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \chi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \chi \\ \vec{E}' &= -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \\ \vec{E}' &= \vec{E}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned} \vec{B}' &= \nabla \times \vec{A}' \\ \vec{B}' &= \nabla \times (\vec{A} + \nabla \chi) \\ \vec{B}' &= \nabla \times \vec{A} + \nabla \times \nabla \chi \\ \vec{B}' &= \nabla \times \vec{A} \\ \vec{B}' &= \vec{B}, \end{aligned} \quad (1.7)$$

pois $\nabla \times \nabla \chi = 0$.

O hamiltoniano não-relativístico de uma partícula carregada movendo-se num potencial eletromagnético (V, \vec{A}) é

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eV, \quad (1.8)$$

resultando na equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eV \right] \Psi(\vec{x}, t). \quad (1.9)$$

Vê-se que a função de onda $\Psi(\vec{x}, t)$ depende de V e \vec{A} , os quais afetam a função de onda mesmo em uma região em que \vec{E} e \vec{B} são nulos.

A integral

$$\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \quad (1.10)$$

é independente do caminho $\Gamma(\vec{x})$ quando $\nabla \times \vec{A} = 0$. Nesse caso,

$$\begin{aligned} & \nabla \left\{ \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \right] \right\} \\ & \nabla \left\{ \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} (dx'_1 A_1 + dx'_2 A_2 + dx'_3 A_3) \right] \right\} \\ & \sum_{j=1}^3 \vec{e}_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} (dx'_1 A_1 + dx'_2 A_2 + dx'_3 A_3) \right] \right\} \\ & \sum_{j=1}^3 \vec{e}_j \frac{ie}{c\hbar} A_j \left\{ \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} (dx'_1 A_1 + dx'_2 A_2 + dx'_3 A_3) \right] \right\} \\ & \left\{ \frac{ie}{c\hbar} \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} (dx'_1 A_1 + dx'_2 A_2 + dx'_3 A_3) \right] \right\} \sum_{j=1}^3 \vec{e}_j A_j \\ & \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \right] \frac{ie}{c\hbar} \vec{A}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Sabe-se que o operador momento linear é

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla. \quad (1.12)$$

A função de onda $\Psi = \Psi_0$ para $\vec{A} = 0$ e $V(\vec{x}, t)$ arbitrário, substituindo (1.12) em (1.9), chega-se a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0 = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)^2 + eV \right] \Psi_0. \quad (1.13)$$

É possível obter (1.13) a partir de (1.9) através da função de onda

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi_0(\vec{x}, t) \exp \left[\frac{ie}{c\hbar} \int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \right]. \quad (1.14)$$

Aplicando o operador $(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})$ sobre Ψ , resulta em

$$\begin{aligned}
& \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi = \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left\{\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} \\
& = -i\hbar\nabla\left\{\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} - \frac{e}{c}\vec{A}\left\{\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)\Psi_0 - i\hbar\Psi_0\nabla\left\{\exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} + \\
& \quad - \frac{e}{c}\vec{A}\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] \tag{1.15} \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)\Psi_0 - i\hbar\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] + \\
& \quad - \frac{e}{c}\vec{A}\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)\Psi_0
\end{aligned}$$

Aplicando o operador $(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2$ sobre Ψ , resulta em

$$\begin{aligned}
& \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\Psi = \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left\{(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} \\
& = -i\hbar\nabla\left\{(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} - \frac{e}{c}\vec{A}\left\{(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla)\Psi_0 - i\hbar(-i\hbar\nabla)\Psi_0\nabla\left\{\exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\right\} + \\
& \quad - \frac{e}{c}\vec{A}(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla)\Psi_0 - i\hbar\frac{ie}{\hbar c}\vec{A}(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] + \\
& \quad - \frac{e}{c}\vec{A}(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla)\Psi_0 \\
& = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)^2\Psi_0
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Substituindo (1.16) em (1.9), tem-se

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi & = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + eV\right]\Psi = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\Psi + eV\Psi \\
& \Rightarrow i\hbar \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right]\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0 \\
& = \frac{1}{2m}\exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right](-i\hbar\nabla)^2\Psi_0 + eV\Psi_0 \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')\right] \\
& \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0 = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\Psi_0 + eV\Psi_0.
\end{aligned} \tag{1.17}$$

O potencial eletromagnético leva a uma mudança na fase da função de onda.

1.1 Experimento da dupla fenda

No experimento da dupla fenda, uma partícula (um elétron, por exemplo), descrita como uma onda plana

$$\Psi = c \exp \left[i \vec{k} \cdot \vec{x} \right], \quad (1.18)$$

atinge uma parede com duas fendas separadas por uma distância d , conforme mostrado na Figura 1. As ondas difratadas que emergem de cada uma das fendas percorrem distâncias com uma diferença δs , chegando a um mesmo ponto do anteparo à direita com uma diferença de fase $\delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$, resultando na superposição das ondas dada por

$$\Psi = c \exp(i\varphi_1) + c \exp(i\varphi_2), \quad (1.19)$$

onde $\varphi_1 = (p/\hbar)s = (p/\hbar)(s + \delta s/2 - \delta s/2)$ e $\varphi_2 = (p/\hbar)(s + \delta s) = (p/\hbar)(s + \delta s/2 + \delta s/2)$.

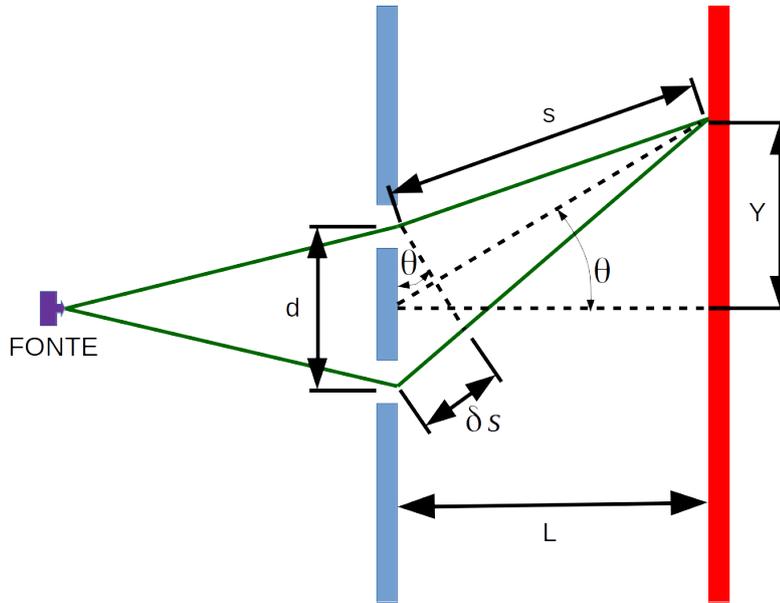


Figura 1 – Experimento da dupla fenda.

A probabilidade de detecção a partícula numa altura Y , medida a partir do centro entre as fendas, é $|\Psi|^2$, a qual é dada por

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= |c \exp(i\varphi_1) + c \exp(i\varphi_2)|^2 \\ &= \left| c \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2 - \delta s/2) \right] + c \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2 + \delta s/2) \right] \right|^2 \\ &= |c|^2 \left| \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2) \right] \exp \left[-i \frac{p}{\hbar} \delta s/2 \right] + \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2) \right] \exp \left[i \frac{p}{\hbar} \delta s/2 \right] \right|^2 \\ &= |c|^2 \left| \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2) \right] \right|^2 \left| \exp \left[-i \frac{p}{\hbar} \delta s/2 \right] + \exp \left[i \frac{p}{\hbar} \delta s/2 \right] \right|^2 \\ &= 4|c|^2 \left| \exp \left[i \frac{p}{\hbar} (s + \delta s/2) \right] \right|^2 \cos^2 \left(\frac{p}{\hbar} \delta s/2 \right) \end{aligned} \quad (1.20)$$

A partir da Figura 2, é possível concluir que

$$\sin(\theta) = \frac{\delta s}{d} \quad (1.21)$$

e

$$\tan(\theta) = \frac{Y}{L}. \quad (1.22)$$

Para $L \gg d$, tem-se $\sin(\theta) \approx \tan(\theta)$ e, portanto,

$$\delta s = \frac{Yd}{L}. \quad (1.23)$$

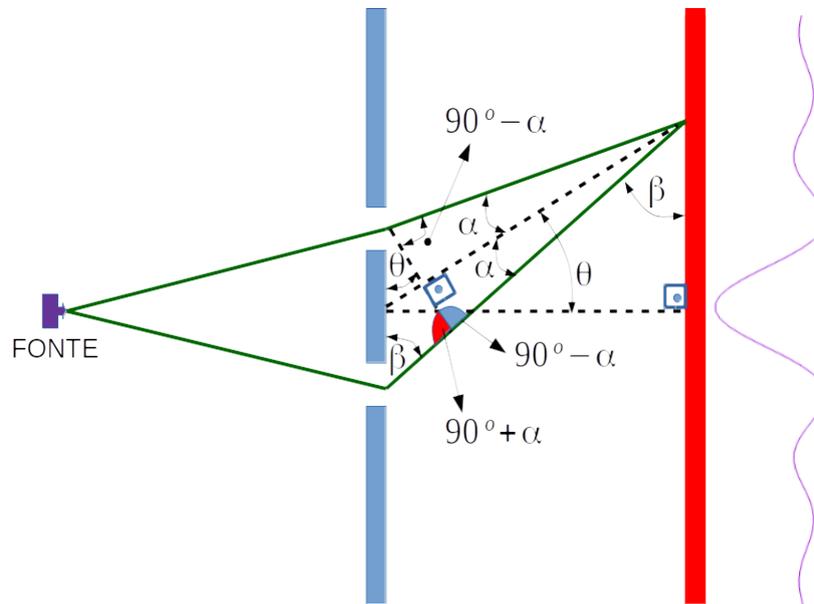


Figura 2 – Os ângulos do experimento da dupla fenda.

Observando a equação (1.20), nota-se que a máxima probabilidade de detecção da partícula ocorre para

$$\frac{p}{\hbar} \delta s / 2 = n\pi, \quad (1.24)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, resultando em

$$\frac{p}{\hbar} \frac{Yd}{2L} = n\pi \Rightarrow Y_n = \frac{n2\pi\hbar L}{pd} = n\pi \Rightarrow Y_n = \frac{n2\lambda\pi L}{d}, \quad (1.25)$$

onde λ é o comprimento de onda de Broglie $\lambda = p/\hbar$ dividido por 2π .

1.2 Diferença de Fase na Presença de um Potencial Vetor

Como visto em (1.14), a presença de um potencial vetor \vec{A} , altera a fase da função de onda de um fator

$$\frac{e}{c\hbar} \int_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}'). \quad (1.26)$$

Dessa forma, as fases com que as ondas difratadas atingem o anteparo, tornam-se

$$\varphi_1 = \varphi_1^0 + \frac{e}{c\hbar} \int_{\Gamma_1} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \quad (1.27)$$

e

$$\varphi_2 = \varphi_2^0 + \frac{e}{c\hbar} \int_{\Gamma_2} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}'), \quad (1.28)$$

em que φ_1^0 e φ_2^0 são as fases das ondas difratadas por cada uma das fendas na ausência de \vec{A} , e Γ_1 e Γ_2 são os caminhos da partícula da fonte até o anteparo, passando por cada uma das fendas, conforme ilustrado na Figura 3.

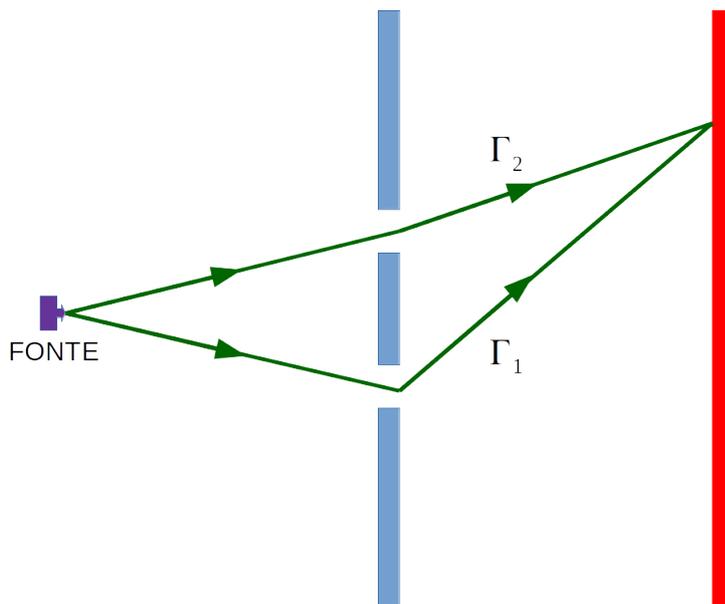


Figura 3 – Dois caminhos possíveis, Γ_1 e Γ_2 , para uma partícula que se desloca da fonte até o anteparo.

Na presença de um potencial vetor \vec{A} , a diferença de fase torna-se, portanto,

$$\begin{aligned} \varphi_2 - \varphi_1 &= \varphi_2^0 - \varphi_1^0 + \frac{e}{c\hbar} \int_{\Gamma_2} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') - \frac{e}{c\hbar} \int_{\Gamma_1} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') \\ \delta\varphi &= \delta\varphi^0 + \frac{e}{c\hbar} \left(\int_{\Gamma_2} - \int_{\Gamma_1} \right) d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}'). \end{aligned} \quad (1.29)$$

A integral $\left(\int_{\Gamma_2} - \int_{\Gamma_1} \right) d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') = \oint_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}')$ é uma integral de linha no percurso fechado mostrado na Figura 4, portanto,

$$\delta\varphi = \delta\varphi^0 + \frac{e}{c\hbar} \oint_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}'). \quad (1.30)$$

Pelo teorema de Stokes, tem-se

$$\oint_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') = \int_S d\vec{S} \cdot (\nabla \times \vec{A}), \quad (1.31)$$

onde S é a região delimitada pelo caminho fechado Γ . Como $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$, chega-se a

$$\oint_{\Gamma} d\vec{x}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') = \int_S d\vec{S} \cdot \vec{B} = \Phi, \quad (1.32)$$

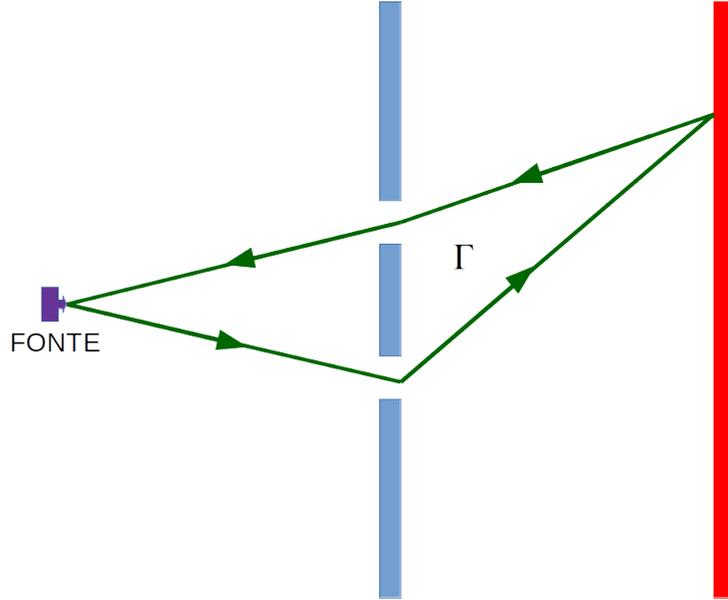


Figura 4 – Caminho fechado Γ para uma partícula que se desloca da fonte até o anteparo passando por uma das fendas e retornando pela outra.

onde Φ é o fluxo magnético que atravessa a região S .

Substituindo (1.32) em (1.29), resulta em

$$\delta\varphi = \delta\varphi^0 + \frac{e}{c\hbar}\Phi. \quad (1.33)$$

Multiplicando a equação anterior por $\frac{L\lambda}{d}$, chega-se à expressão

$$Y_n = Y'_n + \frac{L\lambda}{d} \frac{e}{c\hbar}\Phi. \quad (1.34)$$

Nota-se, portanto, que a passagem de fluxo magnético Φ na região localizada entre os caminhos dos elétrons leva a um deslocamento nos máximos do padrão de interferência proporcional a Φ , dado por $\frac{L\lambda}{d} \frac{e}{c\hbar}\Phi$.

1.3 Invariância de Calibre na Mecânica Quântica

Na mecânica quântica, os operadores posição \hat{x} e momento cinético

$$\Pi = m \frac{d\vec{x}}{dt} = \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad (1.35)$$

são invariantes com relação à transformação de calibre

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi. \quad (1.36)$$

Todavia, o momento canônico \hat{p} não é invariante de calibre e precisa ajustar-se para levar em conta o termo adicional $\nabla\chi$. Como mostrado na referência (SAKURAI; NAPOLITANO;

DAHMEN, 2013), a alteração produzida pela transformação de calibre na função de onda é dada por

$$\Psi' = \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \Psi. \quad (1.37)$$

Como \hat{x} e $\Pi = \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ são invariantes de calibre, seus valores esperados devem ser mantidos após a transformação de calibre:

$$\langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \hat{x} | \Psi' \rangle \quad (1.38)$$

e

$$\langle \Psi | \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A} | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' | \Psi' \rangle. \quad (1.39)$$

Aplicando \hat{p} sobre $\exp(\frac{ie}{c\hbar}\chi)\Psi$, tem-se

$$\begin{aligned} \hat{p} \left[\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right)\Psi \right] &= -i\hbar\nabla \left[\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right)\Psi \right] \\ &-i\hbar\nabla \left[\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right)\Psi \right] - i\hbar\nabla [\Psi] \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right) \\ &-i\hbar\frac{ie}{c\hbar}\nabla\chi\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right)\Psi - i\hbar\nabla\Psi\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right) \\ &\frac{e}{c}\nabla\chi\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right)\Psi + \hat{p}\Psi\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right) \\ &\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\chi\right) \left[\frac{e}{c}\nabla\chi + \hat{p} \right] \Psi, \end{aligned} \quad (1.40)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' \right) \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \hat{p} \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] | \Psi \rangle - \frac{e}{c} \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \vec{A}' \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \left[\frac{e}{c}\nabla\chi + \hat{p} \right] | \Psi \rangle - \frac{e}{c} \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \vec{A}' | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \frac{e}{c}\nabla\chi + \hat{p} | \Psi \rangle - \frac{e}{c} \langle \Psi | \vec{A}' | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{e}{c}\nabla\chi + \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' | \Psi \rangle \\ &\langle \Psi | \frac{e}{c}\nabla\chi + \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' - \frac{e}{c}\nabla\chi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}' | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (1.41)$$

como era esperado. Além disso,

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \hat{x} | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \hat{x} \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] | \Psi \rangle = \langle \Psi | \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \exp\left[\frac{ie}{c\hbar}\chi\right] \hat{x} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.42)$$

2 Efeito Aharonov-Bohm

O efeito Aharonov-Bohm é um fenômeno de interferência que demonstra a influência do potencial eletromagnético sobre a fase da função de onda de uma partícula carregada mesmo em uma região onde os campos eletromagnéticos são nulos.

2.1 Deslocamento do Padrão de Interferência devido à Presença de um Solenóide

A presença de um solenoide infinito no experimento de dupla fenda é ilustrado na Figura 5.

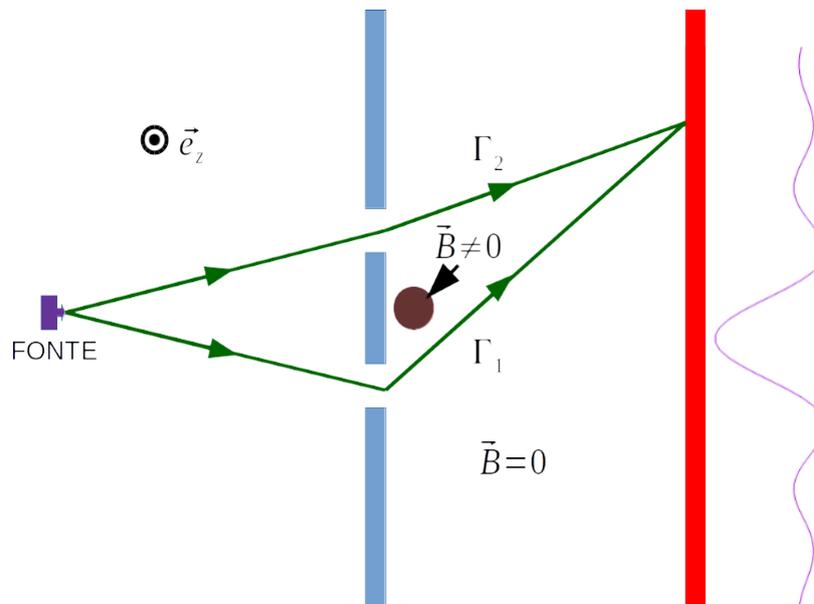


Figura 5 – Presença de um solenoide infinito no experimento de dupla fenda.

Um solenoide infinito possui um campo magnético nulo em seu exterior, e em seu interior, esse campo é dado por

$$\vec{B} = \frac{4\pi}{c} \nu I \vec{e}_z, \quad (2.1)$$

em que I é a corrente circulando nas espiras do solenoide e ν é o número de espiras por unidade de comprimento.

Se r é a distância radial até o centro do solenoide e \vec{e}_ϕ é o versor azimutal em coordenadas polares, e dado um solenoide de raio da seção transversal igual a R , o potencial vetor produzido é

$$\vec{A}(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{\Phi}{2\pi R^2} r \vec{e}_\phi & \text{para } r \leq R; \\ \frac{\Phi}{2\pi} \frac{1}{r} \vec{e}_\phi & \text{para } r > R. \end{cases} \quad (2.2)$$

Como os elétrons atravessam uma região em que os campos eletromagnéticos são nulos, não há atuação da força de Lorentz sobre eles. Todavia, a localização dos máximos do padrão de interferência dos elétrons depende do campo magnético confinado ao solenóide, conforme mostrado na equação

$$Y_n = Y'_n + \frac{L\lambda}{d} \frac{e}{c\hbar} \Phi. \quad (2.3)$$

O fenômeno descrito nesta seção, em que o potencial altera a fase da função de onda, é o efeito Aharonov-Bohm, o qual foi previsto por Yakir Aharonov e David Bohm em 1959 (AHARONOV; BOHM, 1959). A primeira comprovação experimental foi publicada no ano seguinte (CHAMBERS, 1960). Também é possível obter o efeito de alteração da fase da função de onda via fluxo elétrico (BROMLEY; GREINER, 2012).

2.2 Incorporação de Efeitos Macroscópicos ao Efeito Aharonov-Bohm

O desvio de fase que resulta no deslocamento dos máximos do padrão de interferência, mostrado em (2.3), não é devido à força de Lorentz, haja vista o campo elétrico ser nulo na região atravessada pelo elétron, estando o campo magnético confinado ao interior do solenoide.

O efeito macroscópico de deslocamento do padrão de interferência também pode ser calculado pela equação (2.3). A Figura 6 ilustra o caso em que o campo magnético de intensidade B não está confinado ao interior de um solenoide, fazendo com que uma força de Lorentz de módulo $F = (e/c)vB$ atue sobre um elétron com velocidade v . Se essa força for aplicada ao elétron por um tempo τ , o momento linear produzido será de $p_y = \tau F = \tau(e/c)vB$, com ângulo de deflexão $\tan(\theta) = p_y/p = \Delta Y/L$, resultando em

$$\Delta Y = L \frac{p_y}{p} = DL \frac{eB}{pc}. \quad (2.4)$$

Observando a Figura 6, vê-se que o fluxo magnético Φ é dado por

$$\Phi = \oint d\vec{S} \cdot \vec{B} = BDd, \quad (2.5)$$

que substituído em (2.3), produz

$$\Delta Y = \frac{L\lambda}{d} \frac{e}{c\hbar} \Phi = DL \frac{eB}{pc}. \quad (2.6)$$

Esse resultado está de acordo com o previsto pela equação (2.4). Isso corrobora o fato de que o efeito macroscópico de deslocamento do padrão de interferência também pode ser calculado pela equação (2.3).

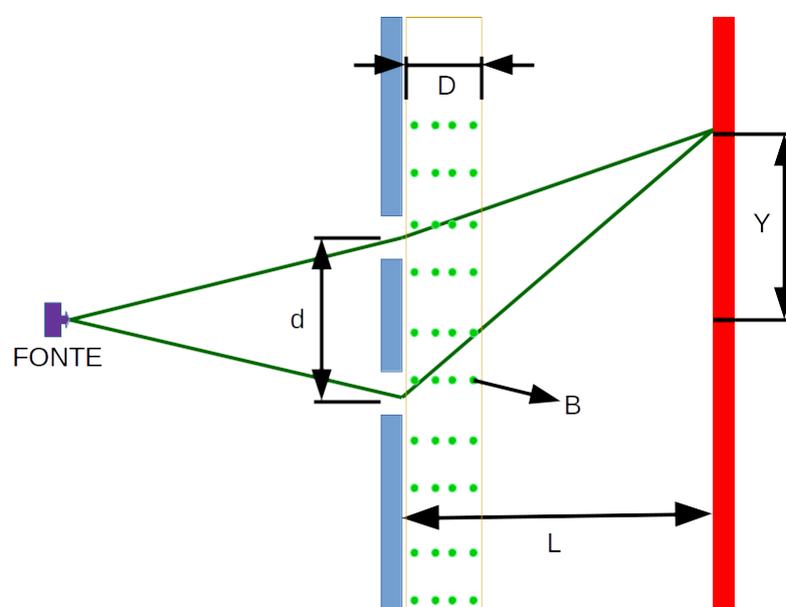


Figura 6 – Experimento de dupla fenda na presença de campo magnético.

3 Anéis Quânticos

Nesse capítulo será estudada a aparência da fase de Aharonov-Bohm para o caso em que um elétron tem o seu movimento restrito a um caminho circular ao redor de um fluxo magnético. Apresentações mais detalhadas dos tópicos abordados nesse capítulo podem ser encontradas em (IHN, 2010) e (NAZAROV; BLANTER, 2009).

3.1 Transmissão em um Anel Aberto

O hamiltoniano que descreve o movimento de uma carga e que interage com um potencial vetor \vec{A} é

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r). \quad (3.1)$$

A uma distância r do centro do anel (em que o fluxo está confinado), o potencial vetor é dado por

$$\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi r} \vec{e}_\varphi. \quad (3.2)$$

O quantum de fluxo magnético é dado por

$$\phi_0 = \frac{hc}{e} = \frac{2\pi\hbar c}{2\pi e} = \frac{2\pi\hbar c}{e}. \quad (3.3)$$

Dessa forma, tem-se

$$\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi r} \vec{e}_\varphi = \frac{2\pi\hbar c}{e} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{1}{2\pi r} \vec{e}_\varphi = \frac{\hbar c}{e} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{1}{r} \vec{e}_\varphi, \quad (3.4)$$

portanto,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e\hbar c}{c} \frac{\phi}{e} \frac{1}{\phi_0} \frac{1}{r} \vec{e}_\varphi \right)^2 + V(r). \quad (3.5)$$

Se o movimento do elétron estiver restrito à circunferência de raio $r = r_0$ no plano $z = 0$, então $\nabla = \hat{e}_r \partial/\partial r + \hat{e}_\varphi (1/r) \partial/\partial \varphi + \hat{e}_z \partial/\partial z$ resume-se ao operador $(1/r) \partial/\partial \varphi$, portanto,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{1}{r_0} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e\hbar c}{c} \frac{\phi}{e} \frac{1}{\phi_0} \frac{1}{r_0} \right)^2, \\ \hat{H} &= \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.6)$$

com $V(r_0) = 0$. A solução da equação de autovalores $\hat{H}\Psi = E\Psi$ pode ser dada por

$$\Psi_l = e^{il\varphi}. \quad (3.7)$$

Substituindo (3.7) em (3.6), chega-se a

$$\begin{aligned} \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\phi}{\phi_0}\right)e^{il\varphi} &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{il\varphi} - \frac{\phi}{\phi_0}e^{il\varphi} \\ &= le^{il\varphi} - \frac{\phi}{\phi_0}e^{il\varphi} = \left(l - \frac{\phi}{\phi_0}\right)\Psi_l, \end{aligned} \quad (3.8)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2\Psi_l &= \left(l - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2\Psi_l, \\ \Rightarrow \hat{H}\Psi_l &= \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}\left(l - \frac{\phi}{\phi_0}\right)^2\Psi_l = E_l\Psi_l, \\ &\Rightarrow l - \frac{\phi}{\phi_0} = \pm\sqrt{\frac{2mr_0^2}{\hbar^2}E_l}, \\ &\Rightarrow l = \pm\sqrt{\frac{2mE_l}{\hbar^2}}r_0 + \frac{\phi}{\phi_0}, \\ &\Rightarrow l = \pm kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE_l}}{\hbar}$ é o número de onda. Há dois estados possíveis para o elétron, que correspondem a circular o anel em sentido horário ou anti-horário, conforme ilustrado na Figura 7.

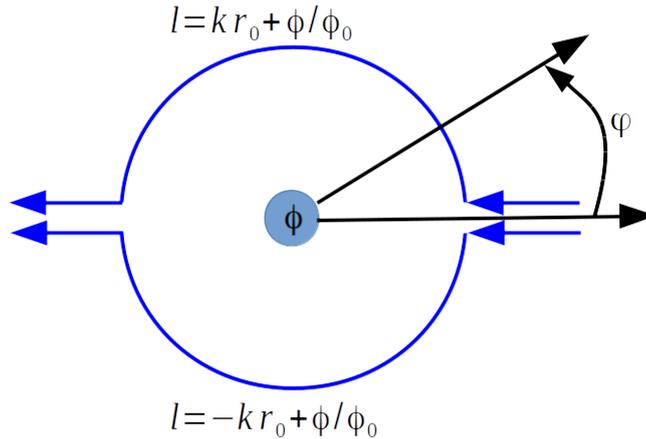


Figura 7 – Esquema simplificado de um anel quântico, para os dois possíveis números quânticos de momento angular $l = \pm kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0}$.

O terminal de entrada pode ser modelado com fase $\varphi = 0$. O elétron pode chegar ao terminal de saída percorrendo o anel em sentido horário até a fase $\varphi = \pi$ ou em sentido

anti-horário até a fase $\varphi = -\pi$. Dessa forma, a função de onda que descreve o elétron transmitido é

$$\Psi = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0})\pi} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(-kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0})(-\pi)} \right] \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.10)$$

onde um dos fatores $\frac{1}{\sqrt{2}}$ é devido a entrada do elétron no anel e o outro fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$ é devido a saída. Dessa forma, a transmissão T é dada por

$$\begin{aligned} T = |\Psi|^2 &= \frac{1}{4} \left| e^{i(kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0})\pi} + e^{i(-kr_0 + \frac{\phi}{\phi_0})(-\pi)} \right|^2 \\ T = |\Psi|^2 &= \frac{|e^{i(kr_0\pi)}|^2}{4} \left[2 \cos \left(\frac{\phi}{\phi_0} \pi \right) \right]^2 \\ T = |\Psi|^2 &= \cos^2 \left(\frac{\phi}{\phi_0} \pi \right) \\ T = |\Psi|^2 &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left(\frac{\phi}{\phi_0} 2\pi \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

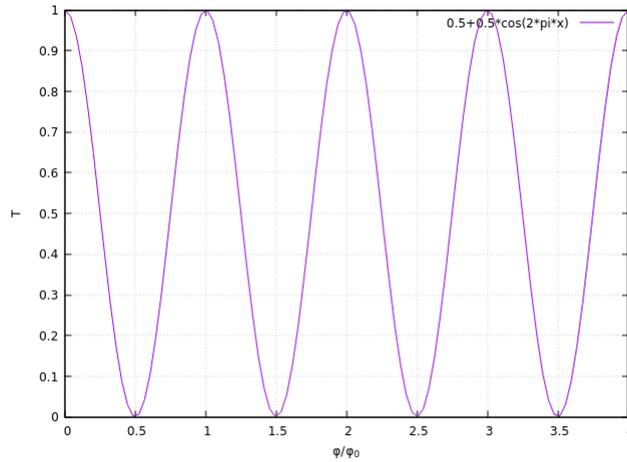


Figura 8 – Transmissão em função do fluxo em um anel quântico, apresentando oscilações de Aharonov-Bohm.

A transmissão possui também um termo independente do fluxo, associado com probabilidades clássicas de reflexão (elétrons refletidos na entrada do anel). Há ainda um outro termo da transmissão, associado com as oscilações Altshuler-Aronov-Spivak (elétrons refletidos após circular completamente o anel).

As oscilações de efeito Aharonov-Bohm acentuam-se com a redução da temperatura, e geralmente não são observadas à temperatura ambiente.

4 Simulação de um Anel Quântico

Neste capítulo é mostrado como simular um anel quântico utilizando o módulo kwant da linguagem python. O objetivo desse capítulo não é descrever os métodos que serviram de base para a criação do pacote kwant, porém, será necessário apresentar alguns poucos conhecimentos sobre modelos de ligações fortes e representação matricial do hamiltoniano. Na primeira seção é apresentado o caso unidimensional. Na segunda seção é apresentado o caso bidimensional. Finalmente, na última seção, é apresentada a descrição detalhada do código python utilizado na simulação do anel quântico, sendo obtida a curva de condutância em função do fluxo magnético.

4.1 Representação Matricial do Hamiltoniano

A Figura 9, ilustra uma cadeia unidimensional formada por cinco sítios atômicos, com índices i variando de 0 a 4.

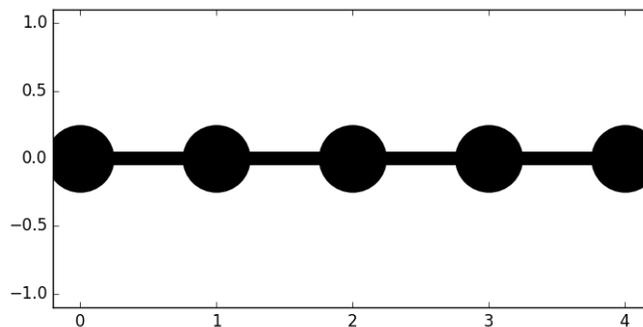


Figura 9 – Cadeia unidimensional formada por cinco sítios atômicos, com índices i variando de 0 a 4

Para uma cadeia unidimensional com constante de rede a , a discretização do hamiltoniano H da equação de Schrödinger,

$$E\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U \right) \Psi = \hat{H}\Psi, \quad (4.1)$$

utilizando uma diferença finita centrada, resulta em

$$E\Psi_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i}{a^2} + U\Psi_i. \quad (4.2)$$

Fazendo

$$t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad (4.3)$$

e $U = 0$, tem-se

$$E\Psi_i = -t\Psi_{i-1} + 2t\Psi_i - t\Psi_{i+1}. \quad (4.4)$$

Para o caso da cadeia mostrada na Figura 9, chega-se as expressões

$$\begin{aligned} E\Psi_0 &= -t\Psi_{-1} + 2t\Psi_0 - t\Psi_1, \\ E\Psi_1 &= -t\Psi_0 + 2t\Psi_1 - t\Psi_2, \\ E\Psi_2 &= -t\Psi_1 + 2t\Psi_2 - t\Psi_3, \\ E\Psi_3 &= -t\Psi_2 + 2t\Psi_3 - t\Psi_4, \\ E\Psi_4 &= -t\Psi_3 + 2t\Psi_4 - t\Psi_5. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Utilizando as condições de contorno

$$\Psi_i(-1) = \Psi_i(5) = 0, \quad (4.6)$$

obtém-se a matriz hamiltoniana

$$H = \begin{pmatrix} 2t & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & 2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & 2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & 2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & 2t \end{pmatrix}$$

4.2 Modelo de Ligações Fortes

Uma rede de Bravais bidimensional é o conjunto de pontos que possuem vetores posição \vec{R} da forma

$$\vec{R} = n_x\vec{a}_x + n_y\vec{a}_y, \quad (4.7)$$

em que \vec{a}_x e \vec{a}_y são vetores no plano da rede e $n_x, n_y \in \mathbb{Z}$. Na Figura 10, é mostrada uma rede de Bravais quadrada.

Os pontos da rede de Bravais podem ser preenchidos com um mesmo conjunto de átomos, denominado de base. Uma rede de Bravais com uma base forma uma estrutura cristalina, que caracteriza os sólidos cristalinos.

A periodicidade da rede de Bravais quadrada com $\vec{R} = n_x\vec{a}_x + n_y\vec{a}_y$ mostrada na Figura 10 resulta na periodicidade do potencial $U(\vec{r})$, dado por

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}). \quad (4.8)$$

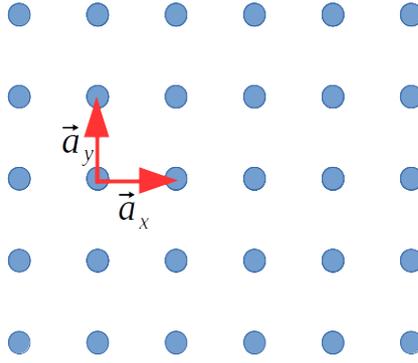


Figura 10 – Rede de Bravais quadrada.

O teorema de Bloch afirma que num potencial periódico a função de onda $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ de um elétron independente, que não interage com os demais elétrons, é dada pelo produto de uma onda plana por uma função periódica da rede $u_{\vec{k}}(\vec{r})$, isto é,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (4.9)$$

com

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}). \quad (4.10)$$

Levando em conta a interação entre os elétrons, a função de onda $\Psi(\vec{r})$ de um elétron em qualquer ponto da rede pode ser obtida através da combinação linear de orbitais atômicos ou LCAO (Linear Combinations of Atomic Orbitals), sendo expressa como

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_m c_m \psi_{\vec{k}}(\vec{r}_m), \quad (4.11)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_m) u_{\vec{k}}(\vec{r}_m), \\ \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_m C_m u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) \Rightarrow C_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_m), \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde \vec{r}_m é a posição do m -ésimo átomo e N é o número total de sítios atômicos (pontos da rede de Bravais quadrada contendo um único átomo).

Resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo para (4.11), tem-se

$$\begin{aligned} H\Psi_{\vec{k}} &= E\Psi_{\vec{k}}, \\ u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) H\Psi_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) E\Psi_{\vec{k}} = E u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) \Psi_{\vec{k}}, \\ u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) H \sum_m C_m u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) &= E u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) \left[\sum_m C_m u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) \right], \\ \sum_m u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) H u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) C_m &= E \sum_m u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) C_m. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Integrando a equação anterior em todo o espaço e definindo

$$H_{nm} = \int u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) H u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) d\vec{r} \quad (4.14)$$

e

$$S_{nm} = \int u_{\vec{k}}^*(\vec{r}_n) u_{\vec{k}}(\vec{r}_m) d\vec{r}, \quad (4.15)$$

obtém-se

$$\sum_m H_{nm} C_m = E \sum_m S_{nm} C_m. \quad (4.16)$$

Da definição de S_{nm} , vê-se que, se $u_{\vec{k}}(\vec{r}_m)$ for ortonormal, então $S_{nm} = 1$ para $n = m$ e $S_{nm} = 0$ para $n \neq m$, portanto,

$$\begin{aligned} EC_n = \sum_m H_{nm} C_m \Rightarrow E = \sum_m H_{nm} \frac{C_m}{C_n} \Rightarrow E = \sum_m H_{nm} \frac{\frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_m)}{\frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_n)}, \\ E(\vec{k}) = \sum_m H_{nm} \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_n)], \end{aligned} \quad (4.17)$$

que é a relação de dispersão para um elétron na rede cristalina.

Para uma constante de rede $|\vec{a}_x| = |\vec{a}_y| = a$, utilizando um modelo de ligações fortes (tight binding), em que ε é o elemento da matriz hamiltoniana correspondente ao sítio atômico e $-t$ é o elemento de salto (hopping) entre átomos que são primeiros vizinhos, conforme ilustrado na Figura 11, tem-se $H_{mm} = \varepsilon$, $H_{nm} = -t$ para $\vec{r}_m - \vec{r}_n = \vec{a}_x$, $\vec{r}_m - \vec{r}_n = \vec{a}_y$, $\vec{r}_m - \vec{r}_n = -\vec{a}_x$, $\vec{r}_m - \vec{r}_n = -\vec{a}_y$, e $H_{nm} = 0$ para outros valores de $\vec{r}_m - \vec{r}_n$. Daí resulta que

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= \varepsilon - t \exp(ik_x a) - t \exp(ik_y a) - t \exp(-ik_x a) - t \exp(-ik_y a), \\ E(\vec{k}) &= \varepsilon - 2t \cos(k_x a) - 2t \cos(k_y a). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Se $E(0) = 0$, então

$$\begin{aligned} E(0) &= \varepsilon - 2t - 2t = \varepsilon - 4t = 0, \\ \varepsilon &= 4t. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Dessa forma, se a matriz hamiltoniana H for discretizada nos sítios atômicos identificados pelas coordenadas espaciais inteiras (i, j) de uma rede com constante de rede a , então

$$H_{n(i,j)m(i,j)} = 4t \quad (4.20)$$

e

$$H_{n(i,j)m(i,j-1)} = H_{n(i,j)m(i-1,j)} = -t. \quad (4.21)$$

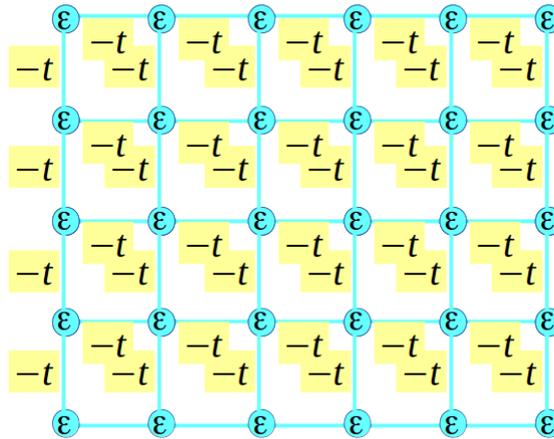


Figura 11 – Modelo de ligações fortes (tight binding), em que ε é o elemento no sítio atômico e $-t$ é o elemento de salto entre átomos que são primeiros vizinhos.

4.3 Simulação do Efeito Aharonov-Bohm

O efeito Aharonov-Bohm em um anel condutor foi simulado através de um programa escrito em linguagem python com o pacote kwant.

Na primeira linha do programa em python, deve-se importar o módulo do kwant:

```
import kwant
```

A matriz hamiltoniana da região de espalhamento é criada através do construtor *Builder()* do módulo kwant:

```
H = kwant.Builder()
```

O método *lattice.square()* cria uma rede quadrada. O argumento desse método é a constante de rede. Foi construída uma rede quadrada e definido o valor da constante de rede $a = 1$:

```
a = 1
rede = kwant.lattice.square(a)
```

Foi utilizado um sistema de unidades em que $t = \hbar^2/(2ma^2)$, e foram criadas as variáveis $r_externo = 20a$, $r_interno = 10a$ e $largura_contato = 8a$, o raio externo do anel, o raio interno do anel e a largura do contato, respectivamente:

```
t = 1.0
r_externo = 20*a
r_interno = 10*a
largura_contato = 8*a
```

A matriz hamiltoniana é definida de maneira que ε seja $4t$ e o elemento de salto entre átomos que são primeiros vizinhos seja $-t$. Para isso, são criados dois laços *for* que varrem todos os pontos da rede, os quais foram aqui identificados como $rede(i, j)$. Para preencher a matriz hamiltoniana, atribui-se diretamente seus valores ao array H criado, utilizando como índices o sítio atômico $[rede(i, j)]$, para o elemento no sítio, e $[rede(i1, j1), rede(i2, j2)]$, para o potencial de salto entre primeiros vizinhos. A matriz hamiltoniana da região de espalhamento é definida como:

```
for i in range(2*r_externo):
    for j in range(2*r_externo):
        if ((i-r_externo)**2+(j-r_externo)**2>(r_interno)**2) \
            and ((i-r_externo)**2+(j-r_externo)**2<(r_externo)**2):
            H[rede(i-r_externo, j-r_externo)] = 4 * t
        if ((i-r_externo)**2+(j-1-r_externo)**2>(r_interno)**2) \
            and ((i-r_externo)**2+(j-1-r_externo)**2<(r_externo)**2):
            H[rede(i-r_externo, j-r_externo), rede(i-r_externo, j\
                -r_externo-1)] = -t
        if ((i-1-r_externo)**2+(j-r_externo)**2>(r_interno)**2) \
            and ((i-1-r_externo)**2+(j-r_externo)**2<(r_externo)**2):
            H[rede(i-r_externo, j-r_externo), rede(i-r_externo-1, j\
                -r_externo)] = -t
```

Os elétrons são modelados como ondas planas que entram na região de espalhamento através de um contato semi-infinito, e saem dela por outro contato semi-infinito. Para definir o hamiltoniano de um contato, utiliza-se o construtor *Builder()*, cujo argumento deve ser um objeto que define a simetria do contato, criado pelo construtor *TranslationalSymmetry()*, que pode ter como argumento um vetor \vec{v} , indicando o módulo e o sentido da translação espacial em que o contato será infinitamente estendido. O vetor \vec{v} deve ser $(-a, 0)$ e $(a, 0)$, respectivamente, nos contatos esquerdo e direito. Os contatos foram construídos:

```
simetria_contato_esquerdo = kwant.TranslationalSymmetry((-a,0))
hamiltoniano_contato_esquerdo = kwant.Builder(simetria_contato_esquerdo)
simetria_contato_direito = kwant.TranslationalSymmetry((a,0))
hamiltoniano_contato_direito = kwant.Builder(simetria_contato_direito)
```

Os hamiltonianos dos contatos foram preenchidos:

```
for j in range(2*r_externo):
    if j>=r_externo-largura_contato/2 \
```

```

and j<=r_externo+largura_contato/2:
    hamiltoniano_contato_esquerdo[rede(0-r_externo,j-r_externo)] = 4*t
    hamiltoniano_contato_esquerdo\
        [rede(1-r_externo, j-r_externo), rede(0-r_externo, j\
            -r_externo)] = -t
if j > r_externo-largura_contato/2:
    hamiltoniano_contato_esquerdo\
        [rede(0-r_externo, j-r_externo), rede(0-r_externo, j - 1\
            -r_externo)] = -t
for j in range(2*r_externo):
    if j>=r_externo-largura_contato/2 \
        and j<=r_externo+largura_contato/2:
        hamiltoniano_contato_direito[rede(0-r_externo,j-r_externo)] = 4*t
        hamiltoniano_contato_direito\
            [rede(2*r_externo+1-r_externo, j-r_externo), rede(2*r_externo\
                -r_externo, j-r_externo)] = -t
    if j > r_externo-largura_contato/2:
        hamiltoniano_contato_direito\
            [rede(2*r_externo-r_externo, j-r_externo), \
                rede(2*r_externo-r_externo, j - 1-r_externo)] = -t

```

O método *attach_lead* tem a função de anexar um contato ao objeto da classe *Builder*. Os hamiltonianos dos contatos foram anexados ao hamiltoniano do sistema:

```

H.attach_lead(hamiltoniano_contato_esquerdo)
H.attach_lead(hamiltoniano_contato_direito)

```

O método *plot* do pacote *kwant* plota o modelo da estrutura que está sendo simulada. A seu turno, esse método utiliza o método *pyplot* do módulo *matplotlib*, sendo necessário, portanto, importá-lo para o programa. Para visualizar o sistema, utilizou-se o código a seguir:

```

from matplotlib import pyplot
kwant.plot(H)

```

Foi criado o array *condutancia*, inicializado com valores iguais a zero:

```

condutancia = [0 for i in range(200)]

```

Foi criado o array *phi*, inicializado com os valores dos fluxos magnéticos no interior do anel em unidades h/e :

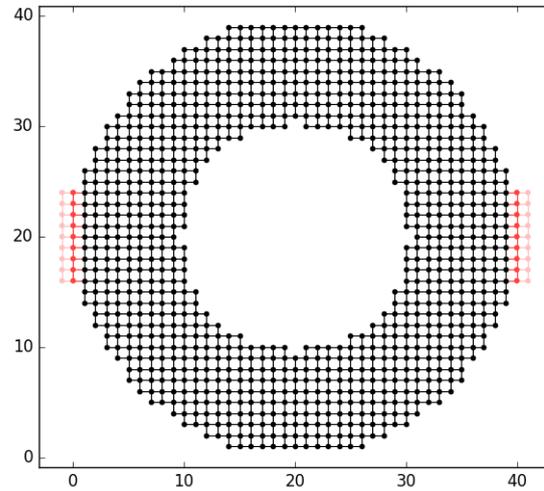


Figura 12 – Anel de Aharonov-Bohm com raio externo $20a$, raio interno $10a$ e largura do contato $8a$. Os pontos da rede são plotados como pontos e os potenciais de salto não-nulos entre dois pontos são representados como linhas que os conectam.

```
phi = [4.0*0.005*i for i in range(200)]
```

Foi importado o módulo *numpy*, que possui o método *exp* (para cálculo da exponencial de um número) e o atributo *pi* (número π):

```
import numpy
```

Em virtude da simetria do anel quântico, tem-se $\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta)$. No entanto, o efeito do fluxo ϕ_B é o de criar uma diferença de fase de Aharonov-Bohm $2\pi \frac{\phi_B}{\phi_0}$:

$$\Psi(\theta + 2\pi) = e^{i2\pi \frac{\phi_B}{\phi_0}} \Psi(\theta), \quad (4.22)$$

satisfazendo uma condição de contorno torcida, a qual está associada a um ramo de corte, como ilustrado na Figura 13.

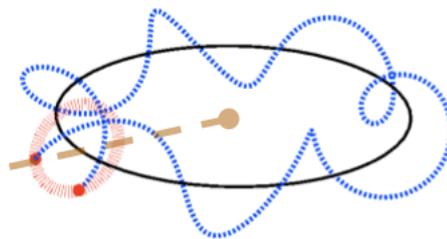


Figura 13 – Condição de contorno torcida associada a um ramo de corte. Fonte: (SANTOS; WANG, 2014)

Criou-se um laço *for* varrendo todos os valores de fluxo magnético do array *phi*. Modificou-se o hamiltoniano dos sítios atômicos sob o ramo de corte ilustrado na Figura 14. Para cada valor de fluxo magnético repetiu-se as tarefas: finalizar o hamiltoniano do sistema, calcular a matriz de espalhamento e calcular a probabilidade de transmissão:

```
for i in range(200):
    for j in range(1,10):
        H[rede(1,j-r_externo), rede(0,j-r_externo)] \
            = -t*numpy.exp(2j*numpy.pi*phi[i])
    Hf=H.finalized()
    matriz_espalhamento = kwant.smatrix(Hf, 0.15*t)
    condutancia[i]=\
        matriz_espalhamento.transmission(1, 0)
```

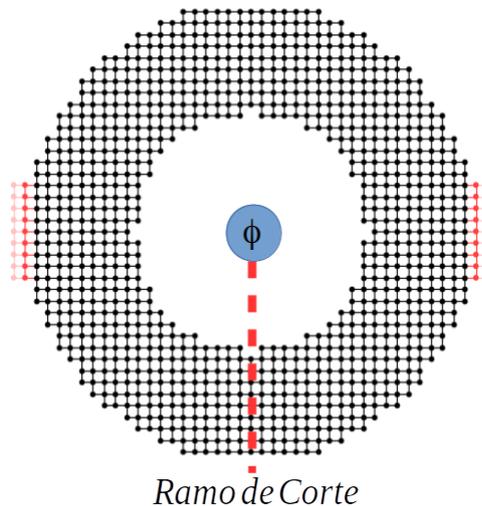


Figura 14 – Ramo de corte utilizado na simulação.

Foi obtido o gráfico da condutância em unidades de e^2/h em função do fluxo magnético em unidades de (h/e) , o qual está mostrado na Figura 15. Para isso, utilizou-se o código:

```
pyplot.plot(phi, condutancia);
pyplot.xlabel('$\phi = BS/(h/e)$');
pyplot.ylabel('g em unidades de $(e^2/h)$');
pyplot.title('Efeito de Aharonov-Bohm')
pyplot.show()
```

Comparando a curva obtida na Figura 15 com o gráfico das oscilações de Aharonov-Bohm em um anel quântico obtidas no capítulo anterior, nota-se que são muito semelhantes,

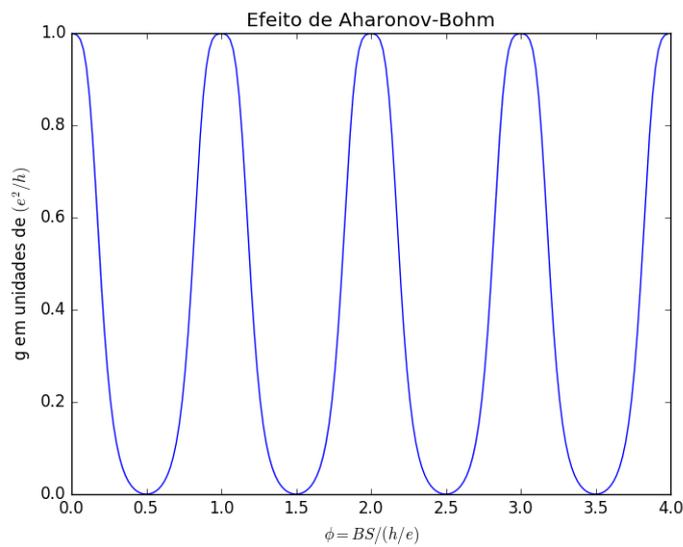


Figura 15 – Condutância em unidades de e^2/h em função do fluxo magnético em unidades de h/e para o anel de Aharonov-Bohm mostrado na Figura 12.

o que demonstra que para os parâmetros utilizados, essas oscilações são mais relevantes que os demais efeitos possíveis.

Conclusão

Nesta monografia são apresentados conceitos básicos de eletrodinâmica e mecânica quântica necessários ao entendimento do efeito Aharonov-Bohm, tais como a definição de força de Lorentz, transformações de calibre e o hamiltoniano não-relativístico de uma partícula carregada em movimento em um potencial eletromagnético. O experimento de dupla fenda foi estudado para dois casos: na ausência e na presença de um potencial eletromagnético. Foi discutida a invariância de calibre na mecânica quântica.

O efeito Aharonov-Bohm foi descrito como um fenômeno de interferência que demonstra a influência do potencial eletromagnético sobre a fase da função de onda de uma partícula carregada mesmo em uma região onde os campos eletromagnéticos são nulos. Além disso, foi mostrado que o efeito macroscópico de deslocamento do padrão de interferência apresenta uma expressão semelhante ao do efeito Aharonov-Bohm.

Foi estudada a ocorrência do efeito Aharonov-Bohm em anéis quânticos. Foi descrito o método das ligações fortes na obtenção da matriz hamiltoniana da região de espalhamento e dos contatos. Foi desenvolvido um programa em Python, com o módulo kwant, voltado para o cálculo da condutância em anéis quânticos. Esse programa foi descrito em detalhes.

Dessa forma, é possível afirmar que os objetivos do trabalho foram alcançados. Além disso, os programas desenvolvidos aqui podem ser facilmente adaptados para outras estruturas.

Referências

AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 115, p. 485–491, Aug 1959. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.115.485>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 30.

ANDO, T. et al. *Mesoscopic Physics and Electronics*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2012. (NanoScience and Technology). ISBN 9783642719769. Nenhuma citação no texto.

BROMLEY, D.; GREINER, W. *Quantum Mechanics: Special Chapters*. Springer Berlin Heidelberg, 2012. ISBN 9783642588471. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Ei7vCAAAQBAJ>>. Citado na página 30.

CHAMBERS, R. G. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 5, p. 3–5, Jul 1960. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.5.3>>. Citado na página 30.

IHN, T. *Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport*. OUP Oxford, 2010. ISBN 9780199534425. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=UdgVDAAAQBAJ>>. Citado na página 33.

NAZAROV, Y.; BLANTER, Y. *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge University Press, 2009. ISBN 9781139478175. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=bjmXJOFmqZIC>>. Citado na página 33.

SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J.; DAHMEN, S. *Mecânica quântica moderna*. Bookman, 2013. ISBN 9788565837095. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=vcI4kgEACAAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 28.

SANTOS, L. H.; WANG, J. Symmetry-protected many-body aharonov-bohm effect. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 89, p. 195122, May 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.195122>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 44.