

Cálculo da Estrutura Eletrônica de Super-Rede de Spin

Instituto de Física - UFG

Mendes,M.S; Souza,M.A.R.

milrian@hotmail.com; marcio@if.ufg.br

Cadastro PRPPG n. 170000085

1 Palavras Chaves

Semicondutores; Super-Redes; Kronig-Penney; Quantização

2 Introdução

O desenvolvimento de heteroestruturas semicondutoras obtidas pela junção de diferentes materiais têm sido intensamente investigadas devido às suas propriedades únicas que não são observadas em meios homogêneos. A repetição periódica de barreiras e poços, nos fornece a configuração das Super-redes semicondutoras, que têm como uma de suas principais características, a quantização da energia, alterando a densidade de estados, que possui características intermediárias entre o caso bidimensional e o tridimensional, devido à formação de faixas de energia. Isto implica no surgimento de algumas propriedades físicas, como ópticas e magnéticas.

3 Objetivos

Calcular a estrutura eletrônica das super-redes semicondutoras para um potencial unidimensional infinito, determinando sua relação de dispersão. Verificar a influência desse potencial na função de onda. Verificar ainda que a energia ocorrem em bandas de estados permitidos, separados por regiões de energia proibida. Verificar alguns casos limites, como do eletron livre e poço infinito.

4 Metodologia

Utilizamos uma aproximação pelo modelo de kronig-Penney que corresponde à

uma sucessão de poços de potenciais quadrados num arranjo periódico, uma vez que esta aproximação conserva as principais características qualitativas do sistema considerado. Utilizaremos o teorema de Bloch para descrever o movimento periódico dos elétrons na rede.

5 Resultados e Discussão

Utilizando o modelo proposto, temos um arranjo periódico de barreiras e poços unidimensionais, com período $c = a + b$, onde a é a largura do poço e b é a largura da barreira. Assim o potencial pode ser descrito por:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L; \\ \infty, & x < 0 \quad \text{ou} \quad x > L. \end{cases}$$

Utilizando a equação de Schrödinger, $\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)))\psi(x) = 0$ onde $\psi(x)$ é a função que descreve o comportamento do elétron, $V(x)$ é a forma do potencial considerado e E é a energia do elétron na rede. Aplicando o teorema de Bloch, que diz que, $\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$, onde a função $u_k(x)$ tem a periodicidade da rede, chegamos à duas soluções que chamamos de $u_1(x)$ e $u_2(x)$ que devem descrever o movimento dos elétrons na rede. Considerando a que a função ψ deve ser contínua, temos quatro condições de contorno descritas por $u_1(0) = u_2(0)$, $u_1(a) = u_2(-b)$, $\frac{du}{dx}(0) = \frac{du}{dx}(0)$ e $\frac{du}{dx}(a) = \frac{du}{dx}(-b)$. Fazendo o determinante das das incógnitas das equações de restrição acima temos que, $\cos k(a+b) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh \beta b \sin \alpha a + \cosh \beta b \cos \alpha a$, que é considerada a relação de dispersão $E(k)$ do elétron na rede, uma vez que $\alpha = (\frac{2m}{\hbar^2}E)^{1/2}$ e $\beta = (\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E))^{1/2}$. Para simplificar a solução, tomamos o caso limite com barreiras altas e estreitas e assim a equação se torna:

$$\cos k(a) = P \frac{\sin(a\alpha)}{a\alpha} + \cos(a\alpha) \quad (1)$$

onde P é designado como o grau de confinamento do elétron no poço dado por

$\lim_{b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty} \frac{\beta^2 ab}{2} = P$ onde no limite de $P \rightarrow 0$ e $P \rightarrow \infty$ caímos no caso do elétron livre e do poço de potencial com barreiras infinitas, respectivamente. A relação direta de $E(k)$ para o elétron, somente é possível com algumas aproximações. Considerando

$P \gg 1$ (elétron ligado fortemente ao poço) e fazendo as limitações necessárias temos:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{P} + (-1)^n 2 \frac{\cos ka}{P}\right) \quad (2)$$

6 Conclusões

Analisando os resultados, vemos que a expressão encontrada para a energia depende de três termos cujo primeiro representa a energia do n -ésimo nível energético do elétron em um poço de potencial isolado de profundidade infinita, o segundo, sendo negativo, implica que sempre haverá uma diminuição da energia, significando que a união dos átomos é favorecida, e o terceiro termo indica o caráter zonal do espectro energético. Observando a equação (1), plotando o gráfico de $\cos ka$ em função de $a\alpha$ vemos que se k varia $\frac{n2\pi}{a}$ vezes, a energia é a mesma. Dentro da região entre $\frac{-\pi}{a}$ e $\frac{\pi}{a}$, temos a região conhecida como primeira zona de Brillouin. As interrupções do espectro energético ocorrem quando o vetor de onda K alcança os valores $\frac{n\pi}{a}$ (limites da zona de Brillouin). Nesses pontos, se expressarmos $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}$, vemos que $n\lambda = 2a$ que corresponde à condição de reflexão de Bragg. Com isso a função de Bloch passa a ser estacionária e não mais progressiva. Assim, os intervalos proibidos aparecem porque há duas maneiras diferentes da amplitude da onda refletida ser igual à amplitude da onda incidente.

Referências

- [1] EINSBERG, R., RESNICK, R., Física Quântica, 2.a edição, Editora Campus (1979)
- [2] REZENDE, Sérgio M., A Física dos Materiais e Dispositivos Eletrônicos. Editora da Universidade Federal de Pernambuco, 1994.
- [3] Szmulowicz, Frank. New eigenvalue equation for the Kronig-Penney problem. Am. J. Phys. 65 (1997).

7 Agradecimentos

Agradecemos ao Cnpq pelo suporte e auxílio à bolsa de iniciação científica.