

(Cadastro PRPPG n. 170000085)

Estrutura Eletrônica de Fios Quânticos Tipo-T com Dopagem Modulada

SOUZA, C. C.[‡]; SOUZA, M. A. R.[◇]; LEÃO, S. A. (Instituto de Física-UFMG)

[‡] claudineicaetano@hotmail.com; [◇] marcio@fis.ufg.br

Palavras chave: Estrutura eletrônica, Fios quânticos

1 Introdução

Atualmente pode-se criar sistemas quânticos que confinam os portadores em uma (sistemas Q2D), duas (sistemas Q1D) e três dimensões espaciais (sistemas Q0D). Ao confinarmos os portadores em sistemas como estes, eles apresentam estados discretos e exibem propriedades elétricas não usuais, podendo apresentar propriedades físicas inteiramente novas, o que os tornam grandes candidatos a novos dispositivos semicondutores. Atualmente os sistemas de maior interesse são os Q1D (fios quânticos) e os Q0D (pontos quânticos). Nestes sistemas a energia do elétron é quantizada nas direções do confinamento produzindo uma mudança drástica nas suas propriedades físicas[1].

Uma das heteroestruturas que tem se mostrado bastante atraente por reunir algumas das características citadas anteriormente são os fios quânticos cujo potencial de confinamento tem a forma geométrica de um T. Neste trabalho investigamos uma heteroestrutura constituída por uma super-rede com célula unitária de fios quânticos duplos e assimétricos na forma de T. Estes fios são obtidos ao crescermos uma super-rede de poços quânticos duplos e assimétricos e posteriormente fazemos um corte lateral nesta super-rede para crescermos em cima deste corte e perpendicularmente ao mesmo, um outro poço quântico, este método é conhecido como (cleaved edge overgrowth method-CEO)[2]. Este sistema forma estados eletrônicos Q1D na intersecção dos dois poços crescido em direções perpendiculares, ou seja, um fio quântico nesta intersecção. Ao idealizarmos um dispositivo, devemos ter em mente que propriedade física queremos otimizar, seja ela uma propriedade óptica, de transporte, um espectro de ganho etc. Para compreendermos um pouco melhor este sistema, o investigamos de varias formas; mudando as larguras dos poços verticais, variando a barreira que separa estes poços da célula unitária e variando também a densidade de impurezas doadoras[3].

2 Modelo Teórico

Usamos a aproximação da massa efetiva para calcular a estrutura eletrônica das sub-bandas resolvendo auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson. Neste método descrevemos o movimento dos elétrons livres ao longo do fio, tratando o elétron com massa efetiva m^* e os efeitos da não parabolicidade da banda não serão considerados.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m^*(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} \right) + V_{ef} \right] \phi_n(x, y) = \varepsilon_n \phi_n(x, y), \quad (1)$$

$$V_{ef} = V_{ef}(x, y) = V_{ext}(x, y) + V_{xc}(x, y) + V_H(x, y). \quad (2)$$

Aqui $V_{xc}(x, y)$ é o potencial de troca e correlação e V_H é o potencial de Hartree, que nos fornece a interação eletrostática entre os elétrons e é obtido a partir da equação de Poisson, a qual é dada por:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla V_H) = e^2 [N_d(x, y) - N_a(x, y) - \eta(x, y)], \quad (3)$$

Com

$$\eta(x, y) = \sum_i N_{i, k_x} |\phi_{i, k_x}(x, y)|^2, \quad (4)$$

em que N_{i, k_x} é o número de elétrons por unidade de comprimento na i -sub-banda, e ele é dado por,

$$N_{i, k_x} = \frac{n_i}{L_z} = \begin{cases} \frac{1}{\pi a_0^*} \cdot \sqrt{\frac{K_B T 2m^* a_0^{*2}}{\hbar^2}} F_{-1/2}(\eta_i) & \text{se } T \neq 0 \\ \frac{2}{\pi a_0^*} \cdot \sqrt{\frac{2m^* a_0^{*2}}{\hbar^2}} \cdot \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_{i, k_x}} & \text{se } T = 0 \end{cases} \quad (5)$$

aqui, ε_{i, k_x} é a energia da sub-banda i , T é a temperatura, ε_F é a energia de Fermi, $F_{-1/2}(\eta_i)$ é a função de Fermi-Dirac com $\eta_i = (\varepsilon_F - \varepsilon_{i, k_x})/K_B T$.

3 Resultados

Estamos interessados em calcular uma propriedade óptica não linear o $\chi^{(3)}$ destes fios na forma de T. Para maximizar os efeitos devido a esta propriedade, precisamos de um sistema cuja relação de dispersão apresentem comportamento não parabólico e que a primeira sub-banda esteja semi-preenchida. Tendo isto em vista usamos o método apresentado na

seção 2, para investigar vários sistemas em busca destas características. Investigamos estas características em função dos seguintes parâmetros: densidade de impurezas doadoras, largura dos poços horizontais e verticais, largura da barreira, concentração de Al na liga $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ que constitui os poços horizontais e verticais variando sua profundidade, voltagem de gate. Inicialmente variamos a largura dos poços e verificamos que quanto mais largos forem os poços menor será o espaçamento entre os seus níveis de energia. A largura da barreira influencia na interação entre os fios quânticos, para barreiras largas os fios não interagem e a relação de dispersão é praticamente uma reta, entretanto, para barreiras pequenas o suficiente a interação é tal que a relação de dispersão é quase parabólica. A ocupação da primeira sub-banda pode ser controlada via a densidade de impurezas doadoras e via o potencial aplicado ao gate sobre sua estrutura eletrônica.

4 Conclusão

Calculamos a estrutura eletrônica de diferentes fios quânticos tipo-T, e obtivemos que a primeira sub-banda está parcialmente ocupada. Verificamos que à medida que a interação entre os fios diminui a relação de dispersão fica plana. A voltagem de gate não muda o perfil da relação de dispersão, apenas sua ocupação. Trabalho financiado pelo CNPq.

Referências

- [1] C. Weisbuch and B. Vinter. *Quantum semiconductor structures*. Academic Press, San Diego, 1991.
- [2] W. Wegscheider, W. Kang, L. N. Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer, and K. W. Baldwin. High-mobility transport along single quasi-1D quantum wires formed by cleaved edge overgrowth. *Solid-State Electronics*, **37**(4-6), 547, 1994.
- [3] S. R. Andrews and H. E. G. Arnot. Fabrication and optical properties of quantum dots and wires. *Superlatt. and Microstruc.*, **9**(4), 433, 1991.