

Cálculo de Estados Eletrônicos de Sistemas Unidimensionais

Rafael M. Gomes¹ Salviano. A. Leão²

Palavras chave: semicondutores, heteroestruturas semicondutoras, fios quânticos e estados eletrônicos.

1 Introdução

Nos últimos anos temos testemunhado um grande desenvolvimento dos métodos teóricos e computacionais de cálculo da estrutura eletrônica e de propriedades físicas da matéria condensada. Alguns fatores contribuem decisivamente para este desenvolvimento. O primeiro deve-se ao uso mais intenso da teoria do funcional da densidade (*Density Functional Theory*, DFT), a qual viabiliza uma abordagem mais simples do problema de muitos corpos no cálculo da estrutura eletrônica dos sólidos e também de sistemas atômicos, e o segundo deve-se ao progresso no campo da física computacional que tornou possível uma análise quantitativa das propriedades físicas dos sistemas complexos.

O objetivo deste trabalho será calcular a estrutura eletrônica de fios quânticos, com potencial de confinamento, na forma de \mathbf{T} e \mathbf{V} . E, com isso, investigar a natureza do confinamento do gás de elétrons, verificando se ele apresenta um caráter de gás de elétrons quase-2D ou quase-1D, e a região onde ele irá ocorrer.

2 Metodologia

Os estados eletrônicos são obtidos, através da solução autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson. Para resolvermos a equação de Poisson, por uma questão de simplicidade computacional, usamos um algoritmo que leva em conta o fato de que uma das dimensões do sistema é periódica. Já os métodos numéricos utilizados para resolver a equação de Poisson [[1, 2]] em duas dimensões com condições de contorno finitas em ambas as direções são iterativos, o que requer um esforço computacional maior. O fato do sistema

¹Instituto de Física, UFGO.

rafaelmoraigomes@yahoo.com.br

²Instituto de Física, UFGO.

salviano@if.ufg.br

ser periódico em uma das direções possibilita-nos utilizar o algoritmo de *Fast Fourier Transform* nos cálculos, otimizando o tempo computacional, entretanto, precisamos usar uma malha com uma discretização uniforme. Os sistemas bidimensionais com condições de contorno periódicas em ambas as direções não oferecem dificuldade do ponto de vista numérico, e a princípio convergem rapidamente.

O método numérico que utilizamos para resolver a equação de Schrödinger foi o *Split-Operator*, o qual nos possibilita estudar a evolução temporal das funções de onda do sistema. Ao fazermos uma propagação no domínio de tempos imaginários, obtemos os auto-estados do sistema.

3 Resultados

3.1 Fio quântico com potencial de confinamento em forma de V

Para o fio quântico tipo-V, averiguamos que as impurezas doadoras são responsáveis diretas pela região de confinamento do gás de elétrons, ou seja, estas impurezas definem se o gás de elétrons quase-1D estão confinados na região côncava ou convexa da camada de *GaAs*, ou ainda, se o gás de elétrons é um gás quase-1D ou quase-2D.

Para observarmos a influência da densidade de impurezas doadoras, variamos esta e mantivemos o sistema a temperatura constante e igual a 0 K, um *spacer* = 0 Å e a largura da camada de impurezas doadoras de 400 Å. A voltagem aplicada ao *gate* foi usada para que apenas a primeira sub-banda de energia do sistema fosse populada, já que, este não influencia na região de confinamento dos elétrons.

3.2 Fio quântico com potencial de confinamento em forma de T

Para o fio com potencial de confinamento tipo-T, observamos que as dimensões dos poços de potenciais é crucial para o definir a região mais provável que os elétrons possam estar confinados. Ao variarmos o valor da temperatura e do potencial de *gate* do sistema, verificamos que muda o valor do estado fundamental do sistema e a população da primeira sub-banda de energia, mas não varia a forma da região de confinamento.

Ao trabalharmos com um fio tipo-T à temperatura de 0 K, densidade de impurezas doadoras $N_A = 0,1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, potencial de *gate* 700 meV e variando a largura do poço vertical e horizontal do sistema observamos que quanto mais largo for os poços mais

dispersos estarão os elétrons na região de confinamento do sistema (intersecção dos poços verticais e horizontais).

Observamos que diferença entre as sub-bandas de energia para um fio com largura do poço vertical $L_v = 40 \text{ \AA}$ e largura do poço horizontal $L_h = 30 \text{ \AA}$, é menor que um fio com largura do poço vertical $L_v = 70 \text{ \AA}$ e largura poço horizontal $L_h = 70 \text{ \AA}$, ambos com densidade a mesma de impurezas doadoras $N_D = 3,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

4 Conclusão

Neste trabalho estudamos a formação de gás de elétrons quase-1D e quase-2D. Para o fio quântico tipo-V (*V-groove*), observamos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava e convexa de *GaAs* e verificamos a influência da densidade de impurezas doadoras para determinar qual a região seria populada por elétrons. Usamos o potencial de *gate* para termos somente a primeira sub-banda de energia populada. Ao variarmos a densidade de impurezas doadoras e o potencial de *gate* verificamos que existia uma faixa de densidade de impurezas doadoras em que se observava a formação de um gás de elétrons quase-2D.

Para o fio quântico tipo-T (*T-wire*), observamos que quanto menor for a dimensão dos poços quânticos verticais e horizontais, mais concentrado estarão os elétrons na região de intersecção destes poços. Este fato pode ser analisado pelas curvas de níveis da função de onda do sistema e pela relação de dispersão dos níveis de energia do sistema, onde vemos que a diferença de energia das sub-bandas do sistema é maior quando a dimensão dos poços quânticos verticais e horizontais for menor. Usamos o potencial de *gate* para assegurarmos que somente a primeira sub-banda de energia estava populada.

Referências

- [1] F. W. Dorr. SIAM Review, **12**(02), 248, 1970.
- [2] J. W. Eastwood and D. R. K. Brownrigg. J. Comput. Phys., **32**, 24, 1979.

Fonte de Financiamento: CNPq/PIBIC.