

Não linearidade Óptica em Fios Quântico tipo T com dopagem modulada

SOUZA, C. C.‡; SOUZA, M. A. R.◊; LEÃO, S. A. (Instituto de Física-UFG)

‡ claudineicaetano@hotmail.com; ◊ marcio@fis.ufg.br

Palavras chave: Estrutura eletrônica, Fios quânticos, nanotecnologia

1 Introdução

Nos dias atuais, a nanotecnologia vem atraindo interesse de inúmeros grupos de pesquisas em todo o mundo, devido ao seu enorme potencial de aplicação nos mais variados setores industriais e ao impacto que seus resultados podem dar ao desenvolvimento tecnológico e econômico, podendo até servir de base para um desenvolvimento local integrado e sustentável, conforme previsto nas Agendas 21 global e local¹. Neste contexto, existe uma infinidade de áreas onde a nanotecnologia pode oferecer uma contribuição significativa, algumas das quais já possuem produtos sendo comercializados. O Brasil vem procurando não ficar fora do cenário internacional deste desenvolvimento tecnológico, e o governo começou um esforço conjunto nesta área, em 2001, conhecido como Iniciativa Brasileira em Nanotecnologia, formando redes de pesquisas cooperativas neste tema, que conta com a participação de várias instituições de pesquisa e ensino em todo o País. Em muitos casos, estas instituições estão expandindo suas fronteiras para se integrar a centros de excelência em nanotecnologia nos Estados Unidos, na Europa, China, América Latina e no Japão.

Estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade têm sido intensivamente estudadas, tanto do ponto de vista da física fundamental quanto do ponto de vista industrial². O imenso desenvolvimento de dispositivos ópticos e eletrônicos, e de circuitos integrados, é

¹Mesmo os cientistas mais conservadores projetam um futuro inovador a partir da nanociência e da nanotecnologia. São áreas consideradas emergentes e, também por isso, estratégicas e extremamente promissoras, com possibilidade de alcançar praticamente todos os campos do conhecimento e movimentar quantias astronômicas de dinheiro. Imagina-se que, brevemente, a capacidade de manipular, fabricar e funcionalizar objetos com medida equivalente ao milionésimo do milímetro gerará sistemas capazes de transportar, através de organismo humano, drogas que atingirão o ponto exato de um tumor. Num exercício de ficção científica, há até mesmo os que antevêm o desenvolvimento de nanorrobôs, com variadas funções. <http://www.inovacaotecnologica.com.br>

²Do ponto de vista científico o principal interesse é entender os fenômenos físicos envolvidos, já do ponto de vista industrial a concentração de interesse é na produção de novos dispositivos com alguma aplicabilidade.

impulsionado por uma evolução tecnológica moderna, onde os maiores avanços são provenientes de pesquisas multidisciplinares³ e principalmente por uma interação estreita entre a física teórica e física experimental. O entendimento do comportamento de materiais em escala nanométrica ocasionou uma revolução na ciência e na tecnologia. Materiais em escala nanométrica apresentam novos comportamentos e propriedades diferentes daquelas que geralmente apresentam em escala macroscópica. Ao ramo da ciência que estuda esses materiais ou o comportamento desses materiais é atribuído o nome de nanociência, e sua aplicação de nanotecnologia.

Com o alto grau de desenvolvimento da nanotecnologia de fabricação de dispositivos semicondutores pode-se crescer heteroestruturas semicondutoras de dimensões bastante reduzidas, e com um grande controle de suas características físicas, o que permite criar novos dispositivos com novas características físicas [1, 2]. Atualmente pode-se criar sistemas quânticos que confinam os portadores em uma (sistemas Q2D), duas (sistemas Q1D) e três dimensões espaciais (sistemas Q0D) [3, 4]. 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[5].

2 Sistema Investigado

Investigamos um sistema composto por fios quânticos tipo-T com dopagem modulada formado pela heteroestrutura de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs mostrado na figura 1. Este é um fio quântico onde sua célula unitária é composta por dois poços quânticos verticais com diferentes larguras e um poço quântico horizontal, e o chamamos de fios quânticos duplo e assimétricos com dopagem modulada, este sistema tem sua relação de dispersão bastante populada, o que nos trouxe o interesse de calcular uma propriedade óptica conhecida como χ^3 , vamos calcular os valores da relação de dispersão para a primeira zona de Brillouin, pois é a partir da relação de dispersão que calculamos os resultados para não linearidade

³Esta multidisciplinariedade se dá principalmente entre as áreas da física, química, matemática, biociências, ciências de materiais, engenharia eletrônica e engenharia da computação

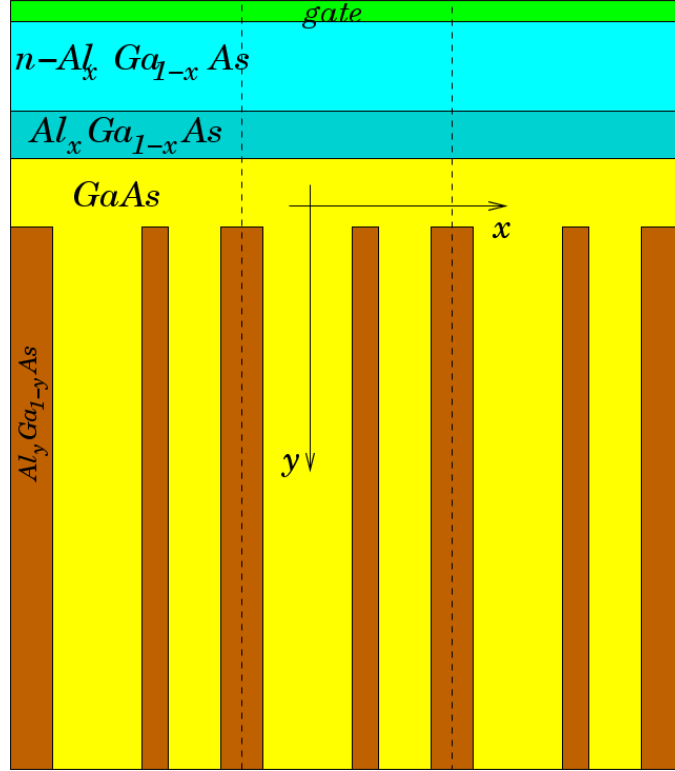


Figura 1: Super-rede de fios quânticos duplos na forma de T

óptica de terceira ordem o χ^3 .

3 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 $\eta_i = (\varepsilon_F - \varepsilon_{i, k_x})/K_B T$.

4 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 3, 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 parabólica, entretanto, para barreiras pequenas o suficiente a interação é tal que a relação de dispersão fica completamente plana. 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.

5 Conclusão

Calculamos a estrutura eletrônica de diferentes fios quânticos tipo-T, e obtivemos que a primeira sub-banda esta parcialmente ocupada. Verificamos que à medida que a interação entre os fios aumenta 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, Capes.

Referências

- [1] S. Koshiya, H. Noge, H. Ichinose, H. Akiyama, Y. Nkamura, T. Inoshita, T. Someya, K. Wada, A. Shimizu, and H. Sakaki. MBE growth of *GaAs* nanometer-scale ridge quantum wires structures and their structural and optical characterizations. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 729, 1994.
- [2] Y. Arakawa. Fabrication of quantum wires and dots by MOCVD selective growth. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 523, 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.
- [4] S. Thoms, I. McIntyre, S. P. Beaumont, M. Al-Mudares, R. Cheung, and C. D. W. Wilkinson. Fabrication of quantum wires in *GaAs/AlGaAs* heterolayers. J. Vac. Sci. Technol. B, **6**(1), 127, 1988.
- [5] C. Weisbuch and B. Vinter. Quantum semiconductor structures. Academic Press, San Diego, 1991.