

Níveis de Impureza em um Fio Quântico Cilíndrico com Barreira de Potencial Infinito na Presença de um Campo Magnético

MOREIRA, Rodrigo Alves; **CRUZ**, Ana Rosa; **MACHADO**, Paulo César Miranda
Escola de Engenharia Elétrica e de Computação, UFG
C.P. 131, 74001-970, Goiânia, GO
Ralves33@hotmail.com, skyred2@terra.com.br, pcesar@eee.ufg.br

Palavras-chave: Fio quântico, Método variacional, Campo magnético.

Introdução

Os avanços recentes na fabricação de heteroestruturas confeccionadas à base de materiais semicondutores, tais como super-redes, poços quânticos, fios quânticos e pontos quânticos, possibilitam a investigação das propriedades eletrônicas em ambientes com dimensão inferior a três [1-4]. Do ponto de vista teórico e acadêmico, este fato de testar nossas teorias e criar novas em outros espaços é de importância fundamental e nos tem levado à descoberta de novos e intrigantes fenômenos, que representam um grande desenvolvimento na física de estado sólido e que tem possibilitado a fabricação de dispositivos eletrônicos mais eficientes, tais como processadores, transistores, geradores de luz laser etc.

A presença de impurezas doadoras é um fator fundamental que limita a mobilidade eletrônica em estruturas semicondutoras, sendo por isso um assunto de grande importância, muito estudado pelos pesquisadores da área de Física de Semicondutores e por engenheiros ligados à área.

Neste trabalho consideramos um fio quântico cilíndrico de GaAs-AlGaAs (Arseneto de Gálio e Arseneto de Gálio e Alumínio) dopado com uma impureza doadora modelada como hidrogenóide e calculamos o nível de energia fundamental de um elétron ligado à impureza e preso ao potencial de confinamento do fio quântico em função do raio do fio.

Material e método

Um método escolhido para resolução foi o método variacional, no qual foram utilizadas formas gaussianas (ou hidrogenóides) para as funções de onda escolhidas como tentativa e, para efeito de comparação de resultados, utilizamos a função de Bessel e a Hipergeométrica confluyente. Um outro método utilizado foi o do valor médio da mecânica quântica, que transforma um problema de três dimensões em um de duas dimensões [1]. Comparamos então os resultados obtidos pelos dois métodos, verificando qual deles apresentou melhores resultados.

Resultados

O problema do fio quântico com barreira de potencial infinito contendo impureza doadora pode está representado na Fig. 1. Como o problema não permite solução analítica para a obtenção da função de onda associada ao elétron, escolhemos algumas funções do tipo hidrogenóide como as apresentadas abaixo para aplicações do método variacional e do valor médio.

Função 1:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = A e^{im\varphi} e^{-\frac{\beta z^2}{2}} e^{-\frac{\alpha \rho^2}{2}} J_m(k\rho)$$

Nesta função α e β são os parâmetros variacionais, A é a constante de normalização e a função $J_m(k\rho)$ é uma função de Bessel, sendo $m = 0,1,2,3,\dots$.

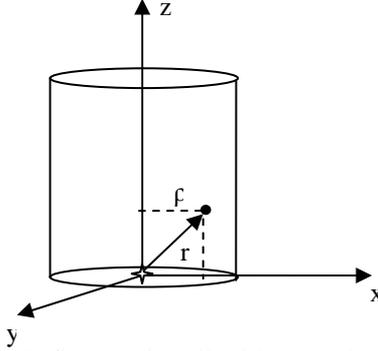


Figura 1: modelo gráfico do fio quântico cilíndrico com impureza doadora no centro.

Função 2:

$$\psi_2(\rho, z, \varphi) = N e^{im\varphi} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} \left(\gamma\rho^2\right)^{\frac{|m|}{2}} M(u, v, \mu)$$

Nesta função N é a constante de normalização e σ é o parâmetro variacional. γ é um termo que está associado ao campo magnético pela relação $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2R_y^*}$, em que \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , R_y^* é o Rydberg efetivo e ω_c é dado por $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$ onde e é a carga elétrica do elétron, m^* a massa efetiva do elétron dentro do fio, c a velocidade da luz e B o campo magnético aplicado. A função $M(u, v, \mu)$ é a hipergeométrica confluyente em que $u = -\frac{E_m}{2\sigma} - \frac{m}{2} + \frac{|m|}{2} + \frac{1}{2}$, $v = |m| + 1$ e $\mu = \gamma\rho^2$.

Função 3:

$$\psi(\rho, \phi, z) = \chi(\rho) e^{im\phi} Z(z)$$

As funções $\chi(\rho)$ e $Z(z)$ são determinadas aplicando-se a equação de Schrödinger:

$$-\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \psi - \gamma \left(i \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right) - \frac{2}{r} \psi = E \psi$$

Após aplicação da equação de Schrödinger, $\chi(\rho)$ e $Z(z)$, são dados por:

$$\chi(\rho) = A e^{-\frac{\gamma\rho^2}{4}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2} \right)^{\frac{|m|}{2}} M\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)$$

$$Z(z) = c_1 |z| e^{-\lambda|z|}$$

A função hipergeométrica confluyente se diferencia das utilizadas anteriormente pelos termos a seguir: $a = \frac{|m|}{2} - \frac{E(\rho)}{2\gamma} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}$ e $b = |m| + 1$. O parâmetro λ transforma o problema tridimensional em bidimensional e será mostrado posteriormente.

Tabela 1: valores das energias do elétron em função do raio para $\gamma = 1,5$.

Raio (Å)	Energia F ₁	Energia F ₂	Energia F ₃
20	131,88496	100,74112	139,86351
25	82,348477	63,027215	89,186019
30	55,666067	42,723304	61,665316
35	39,725022	30,593375	45,077873
40	29,480981	22,794760	34,317711
45	22,531964	17,499680	26,945518
50	17,617281	13,749572	21,676524
60	11,326053	8,935660	14,822861
70	7,633246	6,095470	10,700741
80	5,307187	4,291563	8,033710
90	3,764833	3,084223	6,212044
100	2,702035	2,241739	4,914675
150	0,468270	0,379366	1,884925
200	-	-0,169346	0,864810
300	-0,220687	-0,449848	0,190030
400	-0,231103	-0,489108	-0,008791
500	-0,233048	-0,489844	-0,078940
600	-0,233655	-0,487723	-0,103330

As soluções para as expressões das energias dadas pelas funções 1, 2 e 3 estão representadas a seguir.

Equações obtidas a partir da função 1:

$$E_{coul} = -4\pi A^2 \int_0^R J_m^2(k\rho) e^{-\alpha\rho^2} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta z^2}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} dz$$

$$E_m = 2\pi A^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} (2\alpha + \gamma) m \left[\int_0^R J_m^2(k\rho) e^{-\alpha\rho^2} \rho d\rho \right]$$

$$E_I = -2\pi A^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left[\int_0^R (2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho}) J_{m+1}(k\rho) J_m(k\rho) e^{-\alpha\rho^2} \rho d\rho \right]$$

$$E_{II} = -2\pi A^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left[\int_0^R \left(\alpha^2 \rho^2 - 2\alpha - k^2 - \frac{1}{2}\beta - \frac{1}{4}\gamma^2 \rho^2 \right) J_m^2(k\rho) e^{-\alpha\rho^2} \rho d\rho \right]$$

Equações obtida a partir da função 2:

$$E_M = \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} \int_0^R e^{-\gamma\rho^2} (\gamma\rho^2)^m e^{-\frac{2r}{\sigma}} M^2 \left[-\frac{3}{4}\gamma^2\rho^3 + 3m\gamma\rho - \frac{2\gamma\rho^3}{r\sigma} + \frac{2(m+1)\rho}{r\sigma} + 2\gamma\rho - \frac{\rho}{\sigma^2} - \frac{2\rho}{r} \right] d\rho dz$$

$$E_{M'} = \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} (\gamma \rho^2)^{|m|} e^{-\frac{2r}{\sigma}} MM_1 \frac{u}{v} \left[4\gamma^2 \rho^3 + \frac{4\gamma \rho^3}{r\sigma} - 4m\gamma \rho - 4\gamma \rho \right] d\rho dz$$

$$E_{M''} = -\frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} (\gamma \rho^2)^{|m|} e^{-\frac{2r}{\sigma}} MM_2 \left(\frac{u^2 + u}{v^2 + v} \right) 4\gamma^2 \rho^3 d\rho dz.$$

O termo Ω representa uma integral dupla como mostra a expressão abaixo:

$$\Omega = \int_0^{\infty} \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} (\gamma \rho^2)^{|m|} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M^2 \rho d\rho dz$$

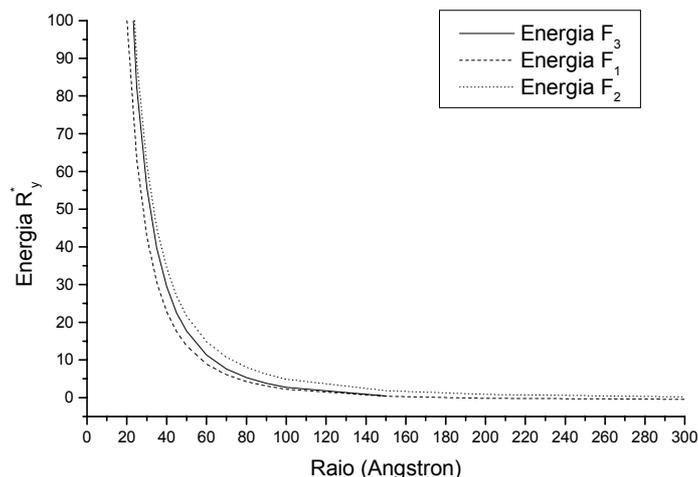


Figura 2: Representação gráfica da tabela 1.

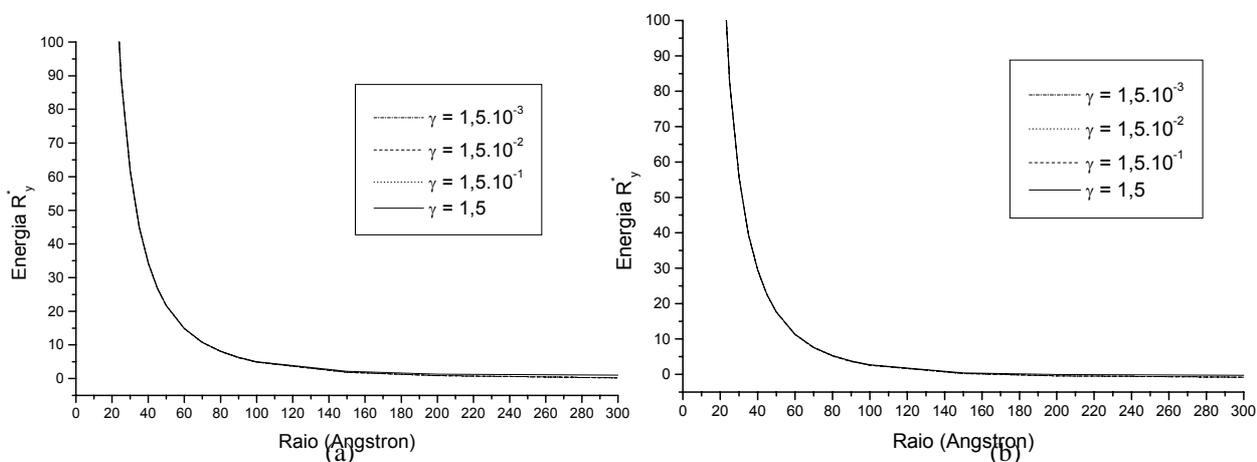


Figura 3: (a) Valores das energias encontradas a partir das equações obtidas pela função 1 e (b) Valores das energias encontradas a partir das equações obtidas pela função 2.

Equação obtida da função 3:

Lembramos que para esta função utilizamos o método do valor médio [1] dado pela expressão $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{Z,\rho} = \left\langle \frac{\lambda}{z} \right\rangle_{Z,\rho}$. Desta equação obtemos a seguinte expressão:

$$4\lambda A^2 \int_0^{\infty} \int_0^R \frac{z^2 e^{-2\lambda z} e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma \rho^2}{2} \right)^{|m|} M^2 \left(a, b, \frac{\gamma \rho^2}{2} \right)}{[\rho^2 + z^2]^{1/2}} dz \rho d\rho = 1$$

Para os valores de λ obtidos da expressão acima obtemos o gráfico da Fig. 3 (b).

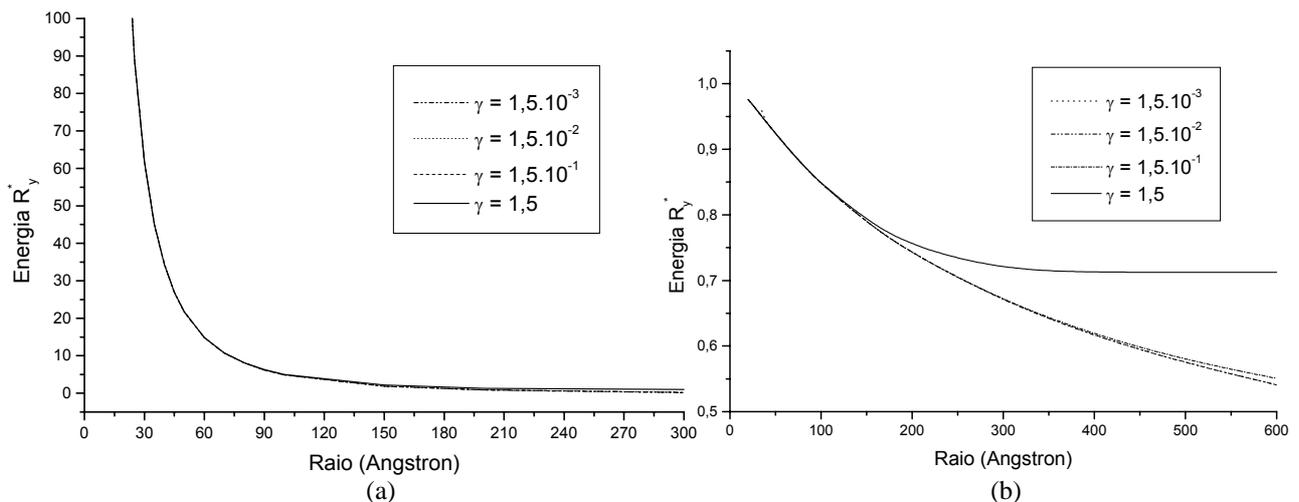


Figura 3: (a) Valores das energias encontradas a partir das equações obtidas pela função 3 e (b) Valores de lambda em função do raio do fio quântico.

Conclusões

O gráfico 3 (b), mostra que lambda decresce com o aumento do raio e tende a 1 (um) quando o raio tende a zero. Quando o campo magnético é variado aumentando de dez em dez vezes, as curvas sofrem uma ascensão e deve tender a uma reta paralela ao eixo do raio, ou seja para qualquer valor de raio lambda será sempre um.

Os gráficos das energias em função do raio mostram que para todas elas, onde os raios são menores, a energia do elétron corresponde a uma energia positiva, o que significa que o elétron está livre da impureza doadora, e que quando a energia se torna negativa (por volta de 200Å) é devido ao fato do elétron estar ligado à impureza pelo potencial coulombiano. Na presença de campo magnético mais intensos o elétron tem mais facilidade em escapar do potencial coulombiano.

Os dados obtidos em média foram mais satisfatórios para função 2, embora para certos valores de raios as funções 1 e 3 apresentam melhores resultados. Com isto podemos concluir que o método variacional pode facilitar muito a solução de problemas que não tem solução exata para função de onda.

Referências:

- [1] BIN, D.; YOU-TONG, W. The impurity energy levels in a cylindrical quantum well wire at weak magnetic field, *Solid State Communications*, 89, (1994) 13-16.
- [2] NICULESCU, E.; GEARBA, A.; CONE, G.; NEGUTU, C. Magnetic field dependence of the binding energy of shallow donors in GaAs quantum-well wires, *Superlattices and Microstructures*, 29, (2001) 319-328.
- [3] PÉREZ-MERCHANCANO, S. T.; MARQUES, G. E. Deformed cyclotronic orbits for shallow impurities in cylindrical quantum well wires, *Solid State Communications*, 110, (1999) 209-214.
- [4] VILLAMIL, P.; CABRA, C.; PORRAS-MONTENEGRO, N. Excited states and infrared transition energies of a donor impurity in cylindrical GaAs-Ga_{0.6}Al_{0.4}As quantum well wires under the action of an applied magnetic field, *Microelectronics Journal*, 36, (2005) 383-388.