UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Efeitos de Correlações e
Excitação de Plásmon em Estruturas Semicondutoras

ANTONIO NEWTON BORGES

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Doutor em Ciências "Física Básica".

Orientador: Prof.Dr.Oscar Hipólito

São Carlos - São Paulo
1993

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE ANTONIO NEWTON BORGES APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 30/04/1993

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Hipólito

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani

Prof. Dr. Gilmar Eudénio Marques

Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva

A meus pais e aos meus
filhos Lucas, Mariana e
Juliana.

Agradeço,

ao prof. Dr. Oscar Hipólito pelo constante apoio e orientação deste trabalho;

ao prof. Dr. M. H. Degani, à prof^a Dr^a Vera Beatriz Campos e ao Salviano A. Leão pelas informações e discussões valiosas;

a todas as pessoas, que direta ou indiretamente, contribuíram para que este trabalho fosse realizado, e em especial: ao Anselmo D. de Oliveira, à Genilda D. Bernardes, ao José M. do Carmo, ao Antonio C. de Faria, Ao Itamar J. Moraes, ao Márcio A. R. Souza e à Célia M. A. Dantas.

Finalmente, gostaria de agradecer à Heliana, minha esposa, pela compreensão e incentivo nos momentos mais difíceis da realização deste trabalho.

RESUMO

O gás de elétrons foi estudado em três e em uma dimensão, sendo que no caso tridimensional investigamos o gás de elétrons oriundo de impurezas doadoras hidrogenóides em germânio e silício. Determinamos, através de cálculos numéricos autoconsistentes, no modelo sugerido por Singwi et al, o fator de estrutura $S(\vec{q})$ e a correção de campo local $G(\vec{q})$ para várias densidades. A partir de $G(\vec{q})$, obtivemos a função dielétrica estática para fazer a blindagem no potencial de Coulomb, do elétron com o íon de impureza. Posteriormente, determinamos a densidade crítica de impurezas em que a transição semiconductor-metal ocorre, através da análise da energia de ligação, determinada por uma aproximação variacional. Para estudarmos os sistemas quase unidimensionais, generalizamos a teoria de Singwi et al., para incluirmos o modelo de multisub-bandas - duas e três sub-bandas. Elaboramos o programa computacional autoconsistente e então aplicamos a teoria para investigarmos as propriedades do gás de elétrons e do gás de polarons em fios quânticos de GaAs/AlGaAs. No caso do gás de elétrons, investigamos dois tipos de confinamento: parabólico e retangular com barreira infinita. Determinamos as excitações coletivas intra e intersub-bandas, o fator de estrutura, a correção de campo local, o potencial efetivo e a função de correlação dos pares, para várias larguras (30nm, 50nm e 100nm), no caso do potencial de confinamento retangular, e para diversas diferenças de energia entre as sub-bandas (1.7meV, 2meV e 6.8meV), no caso do potencial de confinamento parabólico, em um amplo intervalo de densidades. Para determinarmos as propriedades do gás de polarons, utilizamos potencial de confinamento retangular com barreira infinita e calculamos de forma autoconsistente as relações de dispersão do acopla-

mento plásmons-fônons. Os resultados foram, em todas as situações, comparados com os resultados obtidos com a aproximação das fases aleatórias (RPA) demonstrando que o modelo que utilizamos é muito mais adequado para tratarmos os sistemas. Comparamos também, sempre que foi possível, com resultados experimentais e com outros resultados teóricos. Nossos resultados demonstram que os efeitos de correlações de curto alcance são importantes e não devem ser ignorados no estudo das propriedades do gás de elétrons tri e quase unidimensionais e no gás de polarons quase unidimensional.

ABSTRACT

The electron gas was studied in three- and one-dimension. In the tridimensional case, we have investigated the electron gas derived from hydrogenic donor impurities in germanium and silicon. We have determined, using self-consistent numerical calculation, in the model suggested by Singwi et al., the structure factor $S(\vec{q})$ and the local field correction $G(\vec{q})$ for different electronic densities. From $G(\vec{q})$, we have obtained the static dielectric function to make the screening in the Coulomb's potential of the electron with impurity ion. Later, we have determined the critical density of impurities when the semiconductor - metal transition occurs, from the analysis of the binding energy, determined from a variational approach. In order to study the quasi-one-dimensional systems, we have generalized the Singwi et al. theory, to include the multisubband model - two and three subbands. We have elaborated the self-consistent computational program and then we have applied the theory to investigate the electron gas and the polaron gas properties on quantum wires of GaAs/AlGaAs. In the case of electron gas, we have investigated two kinds of confinement: parabolic and rectangular infinite height barrier. We have determined the inter- and intra-subband excitations, structure factor, the local field correction, the effective potential and the pair-correlation function, for several thickness (30nm, 50nm and 100nm), in the case of rectangular confinement, and to some energy differences between subbands (1.7meV, 2meV and 6.8meV), in the parabolic confinement case, in large interval of densities. In order to determine the polaron gas properties, we have used rectangular confinement potential with infinite height barrier and we have calculated in a self-consistent way the coupled plasmon-phonon relations. The results from the random-phase approximation (RPA) are presented for comparison. It shows that this model is appropriate to treat systems. We have compared, always as possible, with experimental and theoretical results. Our results show that the short-range correlations effects are important and should not be ignored in the properties research from the three- and quasi-one-dimensional electron gas and the quasi-one-dimensional polaron gas.

ÍNDICE

I.	INTRODUÇÃO.....	1
II.	TEORIA AUTOCONSISTENTE NO MODELO DO GÁS DE ELÉTRONS HOMOGÊNEO	
II-1.	Introdução.....	5
II-2.	Teoria de Resposta Linear.....	5
II-3.	Fator de Estrutura.....	10
II-4.	Função de Correlação dos Pares.....	13
II-5.	Teoria Autoconsistente - STLS.....	14
III.	APLICAÇÃO DA TEORIA STLS EM SEMICONDUTORES DE MUITOS VALES DOPADOS COM IMPUREZAS DOADORAS	
III-1.	Introdução.....	20
III-2.	Formulação Teórica.....	21
III-3.	Resultados.....	25
III-4.	Conclusões.....	34
IV.	GENERALIZAÇÃO DA TEORIA STLS PARA SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS	
IV-1.	Introdução.....	35
IV-2.	Formulação Teórica.....	37
IV-3.	Resultados.....	41
IV-3.1.	Modelo de Duas Sub-bandas Com Apenas Uma Ocupada.....	42
IV-3.2.	Modelo de Duas Sub-bandas Com Duas Ocupadas.....	49
IV-3.3.	Modelo de Três Sub-bandas Com Apenas Uma Ocupada.....	57
IV-4.	Conclusões.....	64
V.	TEORIA STLS GENERALIZADA APLICADA AO GEQ1D COM POTENCIAL DE CONFINAMENTO PARABÓLICO	
IV-1.	Introdução.....	65

IV-2. Formulação Teórica.....	66
IV-3. Resultados.....	68
IV-3.1. Modelo de Duas Sub-bandas Com Apenas Uma Ocupada.....	69
IV-3.2. Modelo de Duas Sub-bandas Com Duas Ocupadas.....	78
IV-3.3. Modelo de Três Sub-bandas Com Apenas Uma Ocupada.....	82
IV-4. Conclusões.....	87
VI. TEORIA STLS GENERALIZADA APLICADA AO GEQ1D LEVANDO EM CONSIDERAÇÃO O ACOPLAMENTO PLÁSMONS FÔNONS	
VI-1. Introdução.....	88
VI-2. Formulação Teórica.....	90
VI-3. Resultados.....	93
VI-4. Conclusões.....	97
VII. CONCLUSÕES FINAIS.....	98
REFERÊNCIAS.....	103

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Sempre que tratamos com sólidos estamos envolvidos com um problema de muitos corpos; cerca de 10^{23} partículas por cm^3 . Devido ao grande número de partículas e a complexidade das interações envolvidas, uma análise precisa e completa destes sistemas torna-se impraticável. É necessário então desenvolver modelos aproximados, com o objetivo de facilitar o entendimento. O tipo de aproximação utilizada depende do problema específico a ser estudado e das propriedades nas quais estamos interessados. Desse modo é elaborado um modelo que será apropriado para um certo tipo de interação e para um conjunto de densidades do sistema. Então torna-se muito importante termos conhecimento dos trabalhos experimentais que vêm sendo desenvolvidos no sistema que nos interessa, e de seus resultados, que terão papel indispensável no progresso das hipóteses nas quais baseamos o modelo. O desenvolvimento da maioria dos trabalhos realizados atualmente surge de uma interação estreita entre a física teórica e a física experimental.

O objetivo primordial da teoria de muitos corpos é portanto, elaborar tão precisamente quanto possível, modelos para estudar sistemas reais de um ponto de vista determinado, conhecendo-se quais são as partículas envolvidas e, com boa aproximação, quais as forças que agem sobre elas. A busca e a utilização desses modelos é uma atração e um desafio da física do estado sólido.

As excitações elementares de baixa energia, que são estados coletivos devido à aplicação de uma perturbação suficiente-

mente fraca, em um sistema de muitas particulas, podem ser divididas em dois grupos: excitações coletivas (fônons, plásmons, éxcitons, polarons, polaritons) e excitações de partículas simples (quase-partícula e elétrons em sólidos). Para que uma excitação elementar possa ser definida é necessário que a sua vida média (τ) seja muito maior do que o inverso da frequência associada a essa excitação ($\tau\omega_q \gg 1$), isto é, que a excitação possa ser considerada como tendo vida longa. Em um gás de elétrons, a função dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, possui conseqüências significativas para as propriedades físicas dos sólidos. Num limite, $\epsilon(0, \omega)$ descreve as excitações coletivas (os plásmons). Em outro limite, $\epsilon(\vec{q}, 0)$ descreve as blindagens eletrostáticas produzidas por interações elétron - elétron, elétron - rede e elétron - impureza em cristais.

Neste trabalho, investigamos as propriedades de sistemas de muitos corpos, em semicondutores dopados. Utilizamos a teoria do campo autoconsistente desenvolvida por Singwi, Tosi, Land e Sjölander (STLS) [1,2], no modelo do gás de elétrons homogêneo usando a aproximação da resposta linear. A teoria STLS tem sido aplicada, com grande êxito, em diversos sistemas para diferentes dimensões espaciais [3-13] com resultados significativamente melhores quando comparados àqueles obtidos por outras aproximações, em particular à aproximação das fases aleatórias (RPA) - muito utilizada na teoria de muitas particulas. Na teoria STLS, que se constitui em um aprimoramento à aproximação RPA, as correlações de curto alcance, responsáveis pelas correções de campo local, são consideradas e determinadas de forma autoconsistente, fazendo a susceptibilidade dependente da função de correlação dos pares. Devido a essas correlações, há uma diminuição da densidade eletrônica ao redor de cada partícula, associada ao buraco de

Coulomb (repulsão Coulombiana entre os elétrons) e ao buraco de "exchange" devido aos elétrons com spins paralelos. Para um sistema clássico [1], o método consiste em substituir a função distribuição de duas partículas, na equação de Liouville, pelo produto de duas funções distribuição de uma partícula e de uma função de correlação dos pares. Em um sistema quântico [1,2], como veremos no capítulo II, onde descrevemos concisa e genericamente a teoria STLS, obtém-se resultados análogos, levando-se em consideração, na equação de movimento das flutuações de densidade, o termo formado por uma soma de exponenciais com fases aleatórias - desprezado em RPA - substituindo-o por sua média estática.

No capítulo III, usando soluções variacionais na aproximação de massa efetiva, determinamos a concentração crítica de impurezas doadoras hidrogenóides em Germânio e Silício, tridimensionais. Consideramos a anisotropia de massa do elétron ligado e fizemos a blindagem do potencial de Coulomb, da interação elétron - íon de impureza, com a função dielétrica estática, determinada através da teoria STLS que, como dissemos no parágrafo anterior, leva em consideração as correlações de curto alcance. Os resultados obtidos [14], são comparados com os determinados com a aproximação RPA, com outros cálculos teóricos [15-21] e com as medidas experimentais [22-25] da transição semicondutor-metal, em impurezas do tipo n. A boa concordância entre os nossos resultados e os obtidos experimentalmente, nos leva a concluir que, em semicondutores com concentração de impurezas próxima da densidade crítica, há necessidade de se tratar melhor as correlações de curto alcance.

No capítulo IV, generalizamos a teoria STLS para incluirmos o modelo de multisub-bandas - duas e três sub-bandas - em

sistemas unidimensionais [26]. Aplicamos então o modelo a fios quânticos, com potencial de confinamento retangular e barreira infinita. Determinamos, numericamente, as excitações de plásmons intra e intersub-bandas, $\omega(q_x)$, o fator de estrutura, $S(q_x)$, a correção de campo local, $G(q_x)$, o potencial efetivo, $\psi(q_x)$, e a função de correlação dos pares, $g(x)$. Com o intuito de avaliarmos os resultados, utilizamos também a aproximação RPA onde a correção de campo local é ignorada - $G(q_x)=0$.

No capítulo V, utilizamos a teoria STLS generalizada, desenvolvida no capítulo IV - com as devidas alterações -, para investigarmos as propriedades de fios quânticos com potencial de confinamento parabólico. As grandezas $\omega(q_x)$, $S(q_x)$, $G(q_x)$, $\psi(q_x)$ e $g(x)$ também foram determinadas numericamente e posteriormente comparadas com os resultados obtidos com a aproximação RPA e com os determinados com o potencial de confinamento retangular, calculados no capítulo IV.

No capítulo VI, realizamos novas modificações nas equações autoconsistentes da teoria STLS generalizada, para levarmos em consideração o efeito do acoplamento plásmons-fônons e calcularmos de forma autoconsistente as excitações coletivas inter e intrasub-bandas, $\omega(q_x)$, em fios quânticos com potencial de confinamento retangular e barreira infinita. Os resultados obtidos foram avaliados através de comparação com os resultados determinados com a aproximação RPA e com os resultados obtidos por Lutz Wendler et al. [27].

Finalmente, no capítulo VII, apresentamos as conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO II

TEORIA AUTOCONSISTENTE NO MODELO DO GÁS DE ELÉTRONS HOMOGÊNEO

II-1. INTRODUÇÃO

O procedimento utilizado para investigar um sistema de muitas partículas é através de sua resposta a algum tipo de estímulo externo. Pode-se, por exemplo, obter informações a respeito das propriedades eletrônicas e estruturais de um material, através do espalhamento de raios-X, de nêutrons lentos, etc.. Qualquer experimento efetuado em um sistema físico, relaciona a excitação com o estímulo externo, através da medida da resposta ao estímulo. Se a perturbação é suficientemente fraca, isto é, se a interação entre a excitação externa e o sistema é fraca, a resposta do sistema pode ser considerada linear e reflete as propriedades do sistema não perturbado, isto é, do sistema isolado.

Neste capítulo, para desenvolvermos a teoria STLS - seção II-5 -, faremos inicialmente para completeza do trabalho uma apresentação da teoria de resposta linear, de forma razoavelmente condensada na seção II-2. Na seção II-3, definiremos e daremos o significado físico do fator de estrutura dinâmico e estático e, na seção II-4, apresentaremos, com um breve comentário, a função de correlação dos pares.

II-2. TEORIA DE RESPOSTA LINEAR [28-31]

Consideremos, inicialmente, um sistema constituído por

uma distribuição contínua e uniforme de cargas positivas fixas, como por exemplo, os íons em um metal sobre o qual, uma igual distribuição de elétrons se movem livremente. Tal sistema se denomina gás de elétrons homogêneo ou plasma e será nesta aproximação que iremos considerar um metal. Nesta situação, devido à neutralidade do sistema, as densidades de cargas positivas (ρ_+) e de cargas negativas (ρ_-) são iguais, em módulo.

Em seguida, vamos examinar o efeito de um potencial externo, $\phi(\vec{r}, t)$, aplicado ao metal que fará com que apareça uma flutuação na densidade do sistema eletrônico - gás de elétrons:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \int d\omega \rho(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (\text{II-2.1})$$

Supondo que o potencial externo seja suficientemente fraco, a resposta do sistema a essa perturbação, tal como a flutuação de densidade, pode ser descrita através de uma dependência linear dessa flutuação com o potencial de perturbação, $\phi(\vec{q}, \omega)$:

$$\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle = \chi(\vec{q}, \omega) \phi(\vec{q}, \omega) \quad (\text{II-2.2})$$

onde $\phi(\vec{q}, \omega)$ é a transformada de Fourier do potencial externo, $\chi(\vec{q}, \omega)$ é a susceptibilidade generalizada - constante de proporcionalidade da equação (II-2.2) - e a média, $\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle$, é realizada sobre todos os estados do sistema. A função $\chi(\vec{q}, \omega)$ - que mede a resposta do sistema - como dissemos na introdução deste capítulo, irá refletir as propriedades do sistema isolado, uma vez que é obtida da divisão da flutuação da densidade, $\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle$, pelo potencial, $\phi(\vec{q}, \omega)$, que a provocou, o que leva a uma grandeza independente desse potencial externo.

O Hamiltoniano H_T do sistema quântico, constituído de N

partículas é formado por dois termos: o primeiro termo,

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) (\rho_{\vec{q}}^+ \rho_{\vec{q}} - N), \quad (\text{II-2.3})$$

é o Hamiltoniano do gás de elétrons no fundo uniforme de cargas positivas, onde $\varphi(\vec{q})$ é a transformada de Fourier da interação de Coulomb entre os elétrons e

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \quad (\text{II-2.4})$$

é a flutuação da densidade em relação à densidade média ($\rho_0 = N$) - estamos tomando o volume L^3 igual a unidade, neste capítulo. O segundo termo,

$$H_{ex} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\vec{q}} (\rho_{\vec{q}}^+ \varphi(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} + \text{C.C.}), \quad (\text{II2.5})$$

descreve a perturbação fraca, que por hipótese, é introduzida no sistema de maneira adiabática. Supomos que a interação é ligada em $t=-\infty$, e cresce lentamente até seu valor total em $t=0$. A introdução do infinitésimo η é uma garantia de que o termo H_{ex} possa ser tomado como uma pequena perturbação. De fato, como H_{ex} depende da frequência, pode-se estabelecer daí um processo de absorção de energia que, permitido por um longo período de tempo, levaria o sistema de elétrons a se aquecer, e então não poderíamos mais considerar H_{ex} como uma interação fraca. O papel da constante η é então ligar a interação entre os elétrons e a perturbação adiabaticamente, isto é, muito vagarosamente, tal que, transições reais entre os estados eletrônicos não seriam introduzidas por um longo

período de tempo.

Para determinar a susceptibilidade generalizada, $\chi(\vec{q}, \omega)$, vamos supor que o sistema esteja inicialmente no seu estado fundamental, satisfazendo a equação de Schrödinger dependente do tempo, isto é:

$$H_T \Psi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t), \quad (\text{II-2.6})$$

onde $H_T = H + H_{ex}$.

A função de onda, $\Psi(t)$, do Hamiltoniano total (H_T) pode ser expandida em termos da base constituída pelos auto-estados (ψ_n) de H , isto é, do sistema não perturbado ($H \psi_n = E_n \psi_n$),

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (\text{II-2.7})$$

onde os coeficientes $a_n(t)$ da expansão satisfazem às condições de contorno, $a_n(t=-\infty) = \delta_{n0}$, em virtude do sistema estar inicialmente no estado fundamental.

Estes coeficientes são determinados, utilizando a teoria de perturbação de primeira ordem. Substituindo-se então, (II-2.3), (II-2.5) e (II-2.7) em (II-2.6) e conservando somente os termos lineares em $\phi(\vec{q}, \omega)$, obtém-se:

$$a_n(t) = \frac{\phi(\vec{q}, \omega) \left[\rho_{\vec{q}}^+ \right]_{n0} e^{-i(\omega - \omega_{n0} + i\eta)t}}{\hbar(\omega - \omega_{n0} + i\eta)} - \frac{\phi^*(\vec{q}, \omega) \left[\rho_{\vec{q}} \right]_{n0} e^{i(\omega + \omega_{n0} - i\eta)t}}{\hbar(\omega + \omega_{n0} - i\eta)} \quad (\text{II-2.8})$$

onde $(\rho_{\vec{q}})_{n0} = \langle 0 | \rho_{\vec{q}} | n \rangle$ são os elementos de matriz entre o estado fundamental e o estado excitado e, ω_{n0} , são as respectivas

frequências de excitação: $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$. O valor esperado de $\rho_{\vec{q}}$ nos auto-estados do Hamiltoniano H_T , conservando apenas termos lineares nos coeficientes $a_n(t)$, pode ser escrito como:

$$\langle \rho_{\vec{q}}(t) \rangle = \sum_{\vec{n}} \left[(\rho_{\vec{q}})_{0n} a_n(t) e^{-i\omega_{n0}t} + (\rho_{\vec{q}})_{n0} a_n^+(t) e^{i\omega_{n0}t} \right]. \quad (\text{II-2.9})$$

O resultado acima pode ser simplificado, se usarmos o fato de que se $(\rho_{\vec{q}})_{n0} \neq 0$, então $(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} = 0$; ou seja, o mesmo par de estados não pode ser acoplado simultaneamente por $\rho_{\vec{q}}$ e $\rho_{\vec{q}}^+$. Substituindo as expressões dos coeficientes $a_n(t)$ em (II-2.9), obtemos

$$\langle \rho_{\vec{q}}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \phi(\vec{q}, \omega) e^{-i(\omega + i\eta)t} \sum_n \left[\frac{|(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{|(\rho_{\vec{q}})_{n0}|^2}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right]. \quad (\text{II-2.10})$$

Supondo que o sistema seja invariante por uma reflexão temporal ($t \rightarrow -t$), $|(\rho_{\vec{q}})_{n0}|^2 = |(\rho_{\vec{q}}^+)_{0n}|^2 = |(\rho_{\vec{q}})_{n0}|^2$, e usando

$$\langle \rho_{\vec{q}}(t) \rangle = \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle e^{i\omega t}, \quad (\text{II.2.11})$$

chega-se finalmente à expressão para a susceptibilidade generalizada do sistema eletrônico:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{n}} |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 \left[\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right]. \quad (\text{II-2.12})$$

Notamos assim, a partir do resultado obtido em (II.2.12), que as condições de contorno causal, $a_n(t=-\infty) = \delta_{n0}$, de

fato são úteis para descrever a resposta ressonante do sistema, isto é, especifica de que maneira a resposta a uma excitação, cuja frequência é ω , é igual à frequência de excitação "natural" ω_{n0} do gás de elétrons. Como $\eta \rightarrow 0$, podemos utilizar a relação de Dirac,

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x - a + i\eta} = P\left(\frac{1}{x-a}\right) - i\pi \delta(x-a),$$

e escrever

$$\text{Re}\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \left[\frac{2\omega_{n0}}{\omega^2 - \omega_{n0}^2} \right] \quad (\text{II-2.13})$$

e

$$\text{Im}\chi(\vec{q}, \omega) = -\frac{\pi}{\hbar} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \left[\delta(\omega - \omega_{n0}) - \delta(\omega + \omega_{n0}) \right]. \quad (\text{II-2.14})$$

II-3. FATOR DE ESTRUTURA [28-30,32]

As experiências de espalhamento para estudar as propriedades de sistemas eletrônicos, são, em geral, realizadas com nêutrons. Pode-se estudar, no entanto, o caso em que uma partícula de carga Ze , momento P_e e energia $E_e = P_e^2/2M_e$, é espalhada pelo sistema e, por conseguinte, transfere energia e momento para o gás de elétrons. O potencial de interação entre o sistema e a partícula é dado por

$$H_{HH}^{\text{int}} = \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi Ze^2}{q^2} \rho_{\vec{q}}^+ e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_e}, \quad (\text{II-3.1})$$

onde $\vec{R}_e$ é a posição da partícula. Vamos supor que a partícula seja suficientemente rápida para que a aproximação de Born possa ser a-

plicada para descrever o espalhamento. De acordo com a conhecida regra de ouro da teoria de perturbação de segunda ordem, a probabilidade por unidade de tempo, $W(\vec{q}, \omega)$, de que a partícula transfira momento, $\hbar\vec{q}$, e energia, $\hbar\omega$, para o gás de elétrons é dada por

$$W(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\frac{4\pi Ze^2}{q^2} \right]^2 \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \quad (\text{II-3.2})$$

ou

$$W(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\frac{4\pi Ze^2}{q^2} \right]^2 \bar{S}(\vec{q}, \omega), \quad (\text{II-3.3})$$

onde definimos o fator de estrutura dinâmico, $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$, como

$$\bar{S}(\vec{q}, \omega) = \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (\text{II-3.4})$$

e as grandezas $(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}$ e ω_{n0} são as mesmas especificadas na seção anterior.

Embora o fator de estrutura dinâmico, $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$, seja bem definido em $\vec{q}=0$ na eq. (II-3.3), só nos interessam seus valores para $\vec{q} \neq 0$, pois a transferência nula de momento só ocorre quando as partículas atravessam o sistema eletrônico sem interagirem com ele, isto é, sem efetuarem nenhuma colisão. Na seção II-5, redefiniremos o fator de estrutura, de forma a que seja igual ao da eq. (II-3.4) para $\vec{q} \neq 0$ e zero para $\vec{q}=0$.

O fator de estrutura dinâmico, engloba todas as propriedades do sistema de muitas partículas que são relevantes ao espalhamento. É a máxima informação que se pode obter sobre as correlações no espaço e no tempo entre as diferentes partículas. $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$ é real e positivo - nulo para $\omega < 0$ - uma vez que à temperatura ze-

ro, todas as frequências de excitação (ω_{n0}) são sempre positivas.

Podemos relacionar o fator de estrutura dinâmico, com a parte imaginária da susceptibilidade generalizada do sistema para $q \neq 0$, usando a eq. (II-2.14):

$$\text{Im } \chi(\vec{q}, \omega) = -\pi [\bar{S}(\vec{q}, \omega) - \bar{S}(\vec{q}, -\omega)], \quad (\text{II-3.5})$$

enquanto a susceptibilidade generalizada pode ser obtida de $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$ reescrevendo a eq. (II-2.12) na forma

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \bar{S}(\vec{q}, \omega') \left[\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right]. \quad (\text{II-3.6})$$

Nos casos em que não se pode distinguir as energias das partículas espalhadas, como nos experimentos de raio-X, devemos integrar o fator de estrutura dinâmico em ω , para obter o valor médio de $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$, denominado de fator de estrutura estático:

$$\bar{S}(\vec{q}) = \frac{\hbar}{N} \int_0^{\infty} d\omega \bar{S}(\vec{q}, \omega). \quad (\text{II-3.7})$$

O fator de estrutura estático é, em essência, a medida do número de partículas espalhadas por unidade de tempo, através de um ângulo θ . Por conseguinte, é uma grandeza que pode ser medida diretamente em um experimento de espalhamento, desde que, é claro, certas condições experimentais sejam satisfeitas. A relação entre o fator de estrutura, $\bar{S}(\vec{q})$, e a susceptibilidade, $\chi(\vec{q}, \omega)$, quando $\vec{q} \neq 0$, é

$$\bar{S}(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi N} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega). \quad (\text{II-3.8})$$

Por outro lado, usando (II-3.4) e (II-3.7) vemos que o fator de estrutura, $\bar{S}(\vec{q})$, pode ser escrito como

$$\bar{S}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}} |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 = \frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle. \quad (\text{II-3.9})$$

II-4. FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DOS PARES [28,31]

Quando observamos o comportamento de uma única partícula num gás de elétrons, podemos afirmar que todas as posições do volume são, para ela, igualmente prováveis. Já as posições de uma segunda partícula, devido ao fato da primeira estar em um local conhecido, não podem ter a mesma probabilidade em virtude da interação que existe entre elas. A função conhecida como função de correlação dos pares é definida como,

$$g(\vec{r}) = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} [S(\vec{q}) - 1] e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}}, \quad (\text{II-4.1})$$

e estabelece uma maneira formal de como, estando uma determinada partícula num ponto conhecido (por exemplo a origem), calcular a probabilidade de se encontrar uma outra partícula a uma distância r da origem. Então, a função $g(\vec{r})$, expressa a probabilidade que, se uma partícula é observada em uma determinada posição $\vec{r}_0$, outra partícula será encontrada em $\vec{r}_0 + \vec{r}$.

II-5. TEORIA AUTOCONSISTENTE [1,2] - STLS

Vamos investigar o sistema eletrônico, como já expusemos na seção II-2, através de sua resposta a uma perturbação fraca. Nessa aproximação linear, a susceptibilidade generalizada - veja a equação (II-2.2) - é obtida como:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{q}, \omega)}. \quad (\text{II-5.1})$$

Para determinar $\chi(\vec{q}, \omega)$, devemos desenvolver um método que descreva a resposta das partículas a uma perturbação que varia no tempo. Uma maneira formal de fazer isso, é partir da equação de movimento que nos fornece a evolução temporal das flutuações de densidade do gás de elétrons:

$$i\hbar \dot{\rho}_{\vec{q}} = [\rho_{\vec{q}}, H], \quad (\text{II-5.2})$$

onde

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \phi(\vec{q}) (\rho_{\vec{q}}^+ \rho_{\vec{q}} - N) \quad (\text{II-5.3})$$

e $\rho_{\vec{q}}$ é dado por (II-2.3).

O segundo termo de H comuta com $\rho_{\vec{q}}$ de modo que o comutador se reduz à parte da energia cinética e (II-5.2) pode ser rees-

crita como

$$i\hbar \dot{\rho}_{\vec{q}} = \sum_i \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar \vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} \right] e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}. \quad (\text{II-5.4})$$

Para analisarmos o caráter oscilatório do sistema, bem como, para chegarmos a uma equação que envolva o potencial de interação, é conveniente calcularmos a segunda derivada, ou seja:

$$i\hbar \ddot{\rho}_{\vec{q}} = \left[\dot{\rho}_{\vec{q}}, H \right] \quad (\text{II-5.5})$$

que resulta em

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} = - \sum_i \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} \right]^2 e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \sum_{\vec{q}'} \varphi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \rho_{\vec{q}}. \quad (\text{II-5.6})$$

Separando no segundo termo à direita, a parcela em que $\vec{q}=\vec{q}'$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \ddot{\rho}_{\vec{q}} = & - \sum_i \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} \right]^2 e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \varphi(\vec{q}) \frac{q^2}{m} \rho_{\vec{q}} - \\ & - \sum_{\vec{q} \neq \vec{q}'} \varphi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \rho_{\vec{q}}. \end{aligned} \quad (\text{II-5.7})$$

Uma primeira aproximação que se pode fazer em (II-5.7), é desprezar o seu último termo em comparação com o que o antecede. Essa aproximação recebe o nome de aproximação das fases aleatórias

(RPA), em virtude do termo abandonado em (II-5.7) - veja a eq. (II-2.4) - consistir de uma soma de um número infinito de exponenciais com fases que variam aleatoriamente, de modo que grande parte dessas parcelas tendem a se anular, enquanto que o termo em que $\vec{q}=\vec{q}'$, é da ordem de N. Esta aproximação, tem-se revelado satisfatória apenas no limite de altas densidades.

A equação, (II-5.7), nesta aproximação toma a forma

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} + \omega_p^2 \rho_{\vec{q}} = - \sum_i \left[\frac{\hbar q^2}{2m} + \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} \right]^2 e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}, \quad (\text{II-5.8})$$

onde

$$\omega_p^2 = \frac{\varphi(\vec{q}) q N^2}{m} \quad (\text{II-5.9})$$

é a frequência de plasma do gás de elétrons.

A teoria STLS se propõe a considerar o termo que foi desprezado em RPA, o qual pode ser reescrito como

$$- \frac{1}{m} \sum_{\vec{q} \neq \vec{q}'} \varphi(\vec{q}') \vec{q} \cdot \vec{q}' \sum_i e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \sum_j e^{i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}. \quad (\text{II-5.10})$$

Se a soma em j for substituída por sua média estática nas N partículas, teremos:

$$\langle \sum_j e^{i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_{i,j} e^{i(\vec{q}-\vec{q}') \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle = \bar{S}(\vec{q}-\vec{q}'). \quad (\text{II-5.11})$$

Podemos então reescrever (II-5.10) como:

$$-\frac{1}{m} \rho_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} \varphi(\vec{q}') \vec{q}' \cdot \vec{q} \left[\bar{S}(\vec{q}-\vec{q}') - N \delta_{\vec{q}-\vec{q}', 0} \right] =$$

$$-\frac{1}{m} \rho_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} \varphi(\vec{q}') \vec{q} \cdot \vec{q}' s(\vec{q}-\vec{q}'), \quad (\text{II-5.12})$$

onde o termo $N \delta_{\vec{q}-\vec{q}', 0}$ foi introduzido para eliminar a restrição de $\vec{q} \neq \vec{q}'$ que havia no somatório. Redefinimos, então, o novo fator de estrutura estático como sendo,

$$S(\vec{q}) = \bar{S}(\vec{q}) - N \delta_{\vec{q}, 0}. \quad (\text{II-5.13})$$

A nova definição de $S(\vec{q})$, que é zero para $\vec{q}=0$ e coincide com $\bar{S}(\vec{q})$ para valores não nulos de $\vec{q}$, significa na prática, em excluir todas as partículas que passando pelo sistema não sofreram nenhuma colisão e portanto, não contribuíram para a resposta do sistema.

A eq. (II-5.7) pode assim ser escrita como:

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} = - \sum_i \left[\frac{\hbar q^2}{2m} + \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} \right] e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \psi(\vec{q}) \frac{q^2 N}{m} \rho_{\vec{q}}, \quad (\text{II-5.14})$$

onde

$$\psi(\vec{q}) = \varphi(\vec{q}) + \frac{1}{N} \int \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} \varphi(\vec{q}') [S(\vec{q}-\vec{q}') - 1] \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3}. \quad (\text{II-5.15})$$

Como vemos, a eq. (II-5.14) é formalmente idêntica à obtida na aproximação RPA e pode ser tratada igualmente, apenas substituindo $\varphi(\vec{q})$ por $\psi(\vec{q})$.

No formalismo da aproximação RPA, a partir da equação de movimento para as flutuações da densidade ($\rho_{\vec{q}}$), determina-se o valor esperado da transformada de Fourier da flutuação da densidade numérica de partículas, $\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle$. Substituindo este resultado em (II-5.1), chega-se, então, a uma expressão para determinar a susceptibilidade generalizada,

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega)}{1 - \varphi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega)}, \quad (\text{II-5.16})$$

onde $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ é a susceptibilidade na aproximação de Hartree-Fock, ou seja, de um sistema eletrônico não interagente,

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{n_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma} - n_{\vec{p}, \sigma}}{\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}} + i\eta},$$

$$\text{onde } \hbar \omega_{\vec{p}\vec{q}} = \hbar \omega_{\vec{p}+\vec{q}} - \hbar \omega_{\vec{p}} = \frac{\hbar^2}{2m} (2 \vec{q} \cdot \vec{p} + q^2).$$

Na teoria STLS, a susceptibilidade generalizada se escreve, portanto, de forma análoga:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega)}{1 - \psi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega)}. \quad (\text{II-5.17})$$

Usualmente o potencial efetivo autoconsistente, $\psi(\vec{q})$, é escrito na forma

$$\psi(\vec{q}) = \varphi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})], \quad (\text{II-5.18})$$

onde

$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{N} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(q')^2} [S(\vec{q}-\vec{q}') - 1]. \quad (\text{II-5.19})$$

Como no caso clássico, o resultado RPA é formalmente obtido da teoria STLS fazendo a correção de campo local, $G(\vec{q})=0$, na eq. (II-5.18).

As eqs. (II-5.17) e (II-5.19) juntamente com (II-3.8), constituem o conjunto de equações autoconsistentes que deve ser resolvido numericamente, para que se determine as propriedades do gás de elétrons - fator de estrutura, $S(\vec{q})$, Frequência de plasma, ω_p , etc.. A função de correlação dos pares, $g(\vec{r})$, é obtida utilizando-se, na eq. (II-4.1), o fator de estrutura autoconsistente.

CAPÍTULO III

APLICAÇÃO DA TEORIA STLS EM SEMICONDUTORES DE MUITOS VALES DOPADOS COM IMPUREZAS DOADORAS.

III-1 INTRODUÇÃO

O interesse pela investigação de densidades críticas de impurezas doadoras rasas em semicondutores do grupo IV, tem-se verificado tanto do ponto de vista teórico como experimental [14-25]. Para concentração de impurezas suficientemente baixa, Kohn e Luttinger [33] e vários outros pesquisadores [34] resolveram o Hamiltoniano da impureza na aproximação de massa efetiva, usando um cálculo variacional, com uma função de onda tentativa hidrogenóide. Sabemos no entanto, que à medida que aumentamos a concentração de impurezas doadoras em um semicondutor, ocorre a superposição das funções de onda eletrônicas de átomos de impurezas vizinhos permitindo que elétrons se tornem relativamente livres e se movam de um sítio de impureza a outro e, conseqüentemente, estes portadores livres blindam a interação Coulombiana do elétron com o íon de impureza. Considerando esse efeito, ainda dentro da aproximação de massa efetiva, vários cálculos foram realizados utilizando aproximações diferentes para a função dielétrica: Thomas-Fermi [14-17,20], Lindhard [14-16] e Hubbard-Sham [14,18].

Com o intuito de determinarmos a densidade crítica (N_c), em que a transição semicondutor-metal ocorre, calculamos a energia do estado fundamental, em função da densidade eletrônica, de um

elétron ligado a uma impureza. Como potencial de interação, consideramos o Coulombico blindado pela função dielétrica calculada na aproximação STLS, levando em consideração o efeito da anisotropia da massa do elétron e utilizando uma função de onda tentativa que reflete a simetria cilíndrica do sistema. Na aproximação STLS, como dissemos no capítulo I, os efeitos das correlações de curto alcance são levados em consideração através de uma correção de campo local.

As densidades críticas em semicondutores dopados, são baixas (quando comparadas com densidades metálicas) e situam-se aproximadamente em torno de 10^{17} à 10^{19}cm^{-3} . Todavia, a densidade efetiva $r_s = (1/a^*) (3/4\pi N)^{1/3}$, determinada como função da densidade eletrônica (N) é alta, pois ao calcularmos o valor de r_s , utilizamos o raio de Bohr efetivo: $a^* = \epsilon_0 \hbar^2 / m^* e^2$, onde m^* e ϵ_0 são, respectivamente, a massa efetiva e a constante dielétrica do semicondutor. Nossos cálculos foram realizados próximos dessa faixa de densidades ($2 \leq r_s \leq 7$) - consideramos os valores típicos das constantes ($a_{Ge}^* = 38.40 \times 10^{-8} \text{ cm}$ e $a_{Si}^* = 19.33 \times 10^{-8} \text{ cm}$) bem como a degenerescência de vales (ν) do germânio ($\nu=4$) e do silício ($\nu=6$).

III-2 FORMULAÇÃO TEÓRICA

Como as superfícies de energia da banda de condução, no espaço $\vec{k}$, do germânio e do silício são elipsóides da forma,

$$E_{\vec{k}} = \hbar^2 \left[\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m} + \frac{k_z^2}{2m_z} \right] \quad (\text{III-2.0})$$

com m e m_z representando as massas efetivas no plano x-y e na di-

reção z, respectivamente, o Hamiltoniano de nosso sistema, na aproximação de massa efetiva, é dado por

$$H = - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\vec{r}). \quad (\text{III-2.1})$$

Realizando uma transformação de escala, podemos obter um vetor, $\vec{q}$, para um gás de elétrons com massa isotrópica, $m^* = (m m_z^2)^{1/3}$, a partir do vetor anisotrópico $\vec{k}$:

$$\vec{q} = (R^{-1/6} k_x, R^{-1/6} k_y, R^{1/3} k_z), \quad (\text{III-2.2})$$

onde, $R = m_z/m$, é a razão das massas. O potencial de interação entre um determinado elétron e uma impureza pode ser escrito como

$$U(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{V(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, 0)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}), \quad (\text{III-2.3})$$

cuja transformada de Fourier é dada por

$$U(\vec{q}) = V(\vec{q}) / \epsilon(\vec{q}, 0) = \frac{4 \pi e^2}{\epsilon_0 q^2 \epsilon(\vec{q}, 0)}. \quad (\text{III-2.4})$$

$V(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano sem blindagem e $\epsilon(\vec{q}, 0)$ é a função dielétrica estática do sistema. Na aproximação STLS:

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{Q^0(\vec{q}, \omega)}{1 - G(\vec{q}) Q^0(\vec{q}, \omega)}, \quad (\text{III-2.5})$$

onde

$$Q^0(\vec{q}, \omega) = - V(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega) \quad (\text{III-2.6})$$

é a polarizabilidade, $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ é a susceptibilidade de um gás de elétrons não interagente com massa isotrópica m^* . $G(\vec{q})$ é a correção de campo local, expressa em função do fator de estrutura $S(\vec{q})$ por

$$G(\vec{q}) = - \frac{3 R^{1/2}}{8 \pi q_F^3} \int d\vec{q}' \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{|\vec{q}'|^2} [S(|\vec{q} - \vec{q}'|) - 1] \quad (\text{III-2.7})$$

e está relacionada com o potencial efetivo autoconsistente, $\psi(\vec{q})$, através da expressão

$$\psi(\vec{q}) = V(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})]. \quad (\text{III-2.8})$$

Fechando o esquema autoconsistente, o fator de estrutura $S(\vec{q})$ é relacionado com a função dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ através da expressão exata:

$$S(\vec{q}) = - \frac{\hbar}{\pi N V(\vec{q})} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \right]. \quad (\text{III-2.9})$$

As Equações (III-2.5), (III-2.7), e (III-2.9) constituem o conjunto o qual resolvemos autoconsistentemente para calcularmos $G(\vec{q})$ e, posteriormente, $\epsilon(\vec{q}, \omega)$. As partes real e imaginária de $\chi^0(\vec{q}, \omega)$, usadas neste trabalho são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{3 N}{4 E_F} \left\{ 1 + \left(\frac{E_F}{\lambda^3} \right) \cdot \left[(\lambda^2 - \Omega_+^2) \ln \left| \frac{\lambda + \Omega_+}{\lambda - \Omega_+} \right| - \right. \right. \\ \left. \left. - (\lambda^2 - \Omega_-^2) \ln \left| \frac{\lambda + \Omega_-}{\lambda - \Omega_-} \right| \right] \right\} \quad (\text{III-2.10}) \end{aligned}$$

e

$$\operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{3 \pi N}{4 \lambda^3} \left[(\lambda^2 - \Omega_-^2) \Theta(\lambda - |\Omega_-|) - (\lambda^2 - \Omega_+^2) \Theta(\lambda - |\Omega_+|) \right], \quad (\text{III-2.11})$$

com $\Omega \pm = \hbar\omega \pm E(q)$, $\lambda = 2 \sqrt{E(q) E_F}$, $E(q) = \hbar^2 q^2 / 2m^*$, $E_F = \hbar^2 q_F^2 / 2m^*$ onde $q_F = (3\pi^2 N / \nu)^{1/3}$ e $\Theta(x)$, é a função degrau.

Como os autovalores do Hamiltoniano (III-2.1), não podem ser obtidos de forma exata, uma aproximação variacional será adotada para minimizar a energia,

$$E = \int \phi^*(\rho) H \phi(\rho) d\tau, \quad (\text{III-2.12})$$

onde como função de onda tentativa usamos

$$\phi(\rho) = \left(\frac{(4 - \alpha^2) \beta^{3/2}}{4 \pi \alpha^2} \right)^{1/2} \frac{e^{(\alpha/2-1)\rho} - e^{-(\alpha/2-1)\rho}}{\rho}, \quad (\text{III-2.13})$$

com

$$\rho = [(ma/m^*) x^2 + (ma/m^*) y^2 + (m_z a_z / m^*) z^2]^{1/2} \quad (\text{III-2.14})$$

onde $a = \beta \gamma^{-1/3}$ e $a_z = \beta \gamma^{2/3}$. As três letras gregas, α , β e γ , são parâmetros variacionais. A função de onda (III-2.13) é equivalente à função de onda de Hulthén [14] para $\beta = \gamma = 1$. Analogamente, se fizermos $\beta = \gamma = 1$ e tomarmos o limite $\alpha = 0$, a função de onda (III-2.12) torna-se hidrogenóide. Neste capítulo, as unidades de distância e de energia utilizadas são: raio de Bohr efetivo, $a^* = \epsilon_0 \hbar^2 / m^* e^2$, e Rydberg efetivo, $R_y^* = m^* e^4 / 2 \epsilon_0^2 \hbar^2$, respectivamente. Nestas unidades, a expressão para o valor esperado da energia total é dada por

$$E = \langle K \rangle + \langle U \rangle = \frac{1}{24} (a_z + 2a) (4 - \alpha^2) - 8\pi \int \frac{d^3 q W(q_x R^{-1/6} a^{-1/2}, q_y R^{-1/6} a^{-1/2}, q_z R^{1/3} a_z^{-1/2})}{(R^{1/3} q_x^2 + R^{1/3} q_y^2 + R^{-2/3} q_z^2) \epsilon(\vec{q}, 0)} \quad (\text{III-2.15})$$

onde,

$$W(q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{4}{\alpha^2} - 1 \right) \frac{1}{q} \left[\text{Tg}^{-1} \left(\frac{q}{2 - q} \right) + \text{Tg}^{-1} \left(\frac{q}{2 + q} \right) - 2 \text{Tg}^{-1} \left(\frac{q}{2} \right) \right], \quad (\text{III-2.16})$$

é a transformada de Fourier da densidade de partículas, $\phi^*(\rho) \cdot \phi(\rho)$, no espaço dos momentos. Assim, não é necessário conhecermos a forma analítica do potencial STLS, nas coordenadas espaciais.

III-3 RESULTADOS

Para cada concentração de portadores livres de elétrons, resolvemos numericamente as equações autoconsistentes, (III-2.5), (III-2.7), e (III-2.9) para encontrarmos $\varepsilon(\vec{q}, 0)$ e então posteriormente determinarmos, também numericamente, o potencial (III-2.3), e a energia (III-2.15). A energia foi minimizada em relação aos parâmetros α , β e γ e calculada para o germânio e o silício, para valores de $2 \leq r_s \leq 7$.

Nas figuras III-3.1 e III-3.2, mostramos a energia potencial $V(\vec{r}) = r U(\vec{r})$ de um elétron ligado a uma impureza, como função de r , para os potenciais de Thomas-Fermi, RPA e STLS. Os cálculos foram realizados com densidades $N = 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ para o germânio e $N = 4.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ para o silício. Podemos observar, que nas duas figuras, a curva de potencial STLS, fica entre as curvas obtidas para o potencial de Thomas-Fermi e RPA, ou seja: o potencial STLS não superestima os efeitos de blindagens tanto quanto o potencial de Thomas-Fermi e nem os subestima como em RPA, devido a presença das correlações de curto alcance, desprezadas em RPA.

FIGURA III-3.1 - Energia potencial, $V(\vec{r}) = r U(\vec{r})$, em função de r , de um elétron ligado a um íon de impureza doadora em germânio. $U(\vec{r})$ e r foram calculados, respectivamente, em unidades de R_y^* e a^* e os parâmetros utilizados foram: $R = 0.05$, $\nu = 4$ e $N = 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

FIGURA III-3.2 - Energia potencial, $V(\vec{r}) = r U(\vec{r})$, em função de r , de um elétron ligado a um íon de impureza doadora em silício. $U(\vec{r})$ e r foram calculados, respectivamente, em unidades de R_y^* e a^* e os parâmetros utilizados foram: $R=0.2$, $\nu=6$ e $N=4.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Na figura III-3.3, mostramos o fator de estrutura do gás de elétrons com razão de massa, $R=m/m_z=0.2$ - os resultados para $R=0.05$ são qualitativamente equivalentes -, e degenerescência de vales $\nu=1$, para duas densidades diferentes: $r_s=1$ e $r_s=4$. Já na figura III-3.4, mostramos o fator de estrutura do gás de elétrons, com $r_s=2$ e $\nu=1$, para um sistema eletrônico anisotrópico ($R=0.2$) e para para um sistema eletrônico isotrópico ($R=1$). Notamos a partir da figura III-3.3, que o fator de estrutura, na aproximação STLS, depende da densidade apenas para $q < q_F$ e é menos sensível à variação de r_s , do que na aproximação RPA. Os resultados obtidos com a aproximação STLS também convergem para unidade bem mais rapidamente. Como era de se esperar, para densidades mais baixas, a diferença entre os resultados obtidos com RPA e STLS ficam mais acentuadas. Na figura III-3.4, verificamos que para sistemas anisotrópicos, a diferença entre os resultados, obtidos com as aproximações STLS e RPA, é bem maior do que para sistemas isotrópicos e que para $q \approx 0$ os resultados praticamente independem da anisotropia e da aproximação utilizada.

Na figura III-3.5, mostramos o comportamento da energia de ligação de um elétron nos potenciais RPA e STLS, para o germânio, com razão de massa, $R=0.05$, e para o silício com $R=0.2$, com densidades eletrônicas próximas dos valores críticos. Os valores das densidades críticas adimensionais ($N_c^{1/3} a^*$), obtidos para um elétron no potencial RPA, foram de 0.284 para o germânio e de 0.243 para o silício. Estes valores são consideravelmente maiores, respectivamente, do que os valores 0.23 e 0.20, obtidos experimentalmente [22-25]. No entanto, para um elétron no potencial STLS, encontramos 0.249 para o germânio e 0.182 para o silício, o que

FIGURA III-3.3 - Fator de estrutura como função de q/q_F para um gás de elétrons tridimensional anisotrópico, $R=0.2$, para duas densidades diferentes: $r_s=1$ e $r_s=4$.

FIGURA III-3.4 - Fator de estrutura como função de q/q_F para um gás de elétrons tridimensional, calculado com densidade $r_s=2$, para um sistema eletrônico isotrópico, $R=1$, e para um sistema eletrônico anisotrópico, $R=0.2$.

FIGURA III-3.5 - Energia de ligação em unidades de Ry^* , como função de $1/r_s$, para um elétron nos potenciais RPA e STLS. Os cálculos foram realizados para impurezas doadoras em germânio e silício.

demonstra uma melhor concordância com os valores obtidos experimentalmente.

Na tabela III-3.1, apresentamos um sumário dos valores de densidades críticas (transição de Mott), para o germânio e o silício. Todos os resultados teóricos da tabela, com exceção dos extraídos da referência [19], que utiliza o modelo de Berggren, e dos nossos, foram obtidos com blindagens eletrostáticas na aproximação de Thomas-Fermi ou então de Lindhard. Podemos notar que a diferença entre nossos resultados e os experimentais é menor que 10%. Os resultados da referência [19] também estão relativamente de acordo com os resultados experimentais. Quanto aos outros resultados apresentados na tabela, devemos ressaltar o seguinte: em todos os cálculos realizados, os piores resultados foram obtidos quando se utilizou o potencial de Thomas-Fermi. Este potencial, como já salientamos, superestima os efeitos de blindagens e em consequência, obtem-se valores muito baixos para a energia de ligação. Os resultados de Krieger e Nightingale [16] - determinados com uma função de onda tentativa hidrogenóide na aproximação de Lindhard, sem levar em consideração a anisotropia de massa dos elétrons - não distinguem o germânio do silício ($N_c^{1/3} a^* = 0.23$, para germânio e silício); os obtidos por Aldrich [17], com a aproximação de Lindhard, apesar de levar em consideração a anisotropia de massa dos elétrons, contrastam com os resultados experimentais, pois o valor obtido para o silício é maior do que o valor obtido para o germânio. Os obtidos por Greene et al. [15], com uma função de onda tentativa de Hulthén, na aproximação de Thomas-Fermi, são os que mais se distanciam dos resultados experimentais.

TABELA III-3.1 - Valores de densidades críticas ($N_c^{1/3} a^*$) para o germânio e o silício.

	GERMÂNIO	SILÍCIO
<u>ISOTRÓPICO</u>		
Thomas-Fermi, função tentativa hidrogenóide ^a	0.10	0.08
Lindhard, função tentativa hidrogenóide ^a	0.23	0.23
Thomas-Fermi, função tentativa de Hulthén ^b	0.142	0.108
Lindhard, função tentativa de Hulthén ^b	0.271	0.263
Hubbard-Sham, função tentativa de Hulthén ^b	0.299	0.290
Hubbard-Sham, numérico ^c	0.305	0.295
<u>ANISOTRÓPICO</u>		
Thomas-Fermi ^d	0.10	0.10
Lindhard ^d	0.22	0.25
Modelo de Berggren ^e	0.206	0.202
RPA, nossos resultados	0.284	0.243
STLS, nossos resultados	0.249	0.182
Experimental ^f	0.23	0.20

a - [15]

b - [14]

c - [18]

d - [16]

e - [19]

f - [22-25]

III-4 CONCLUSÕES

Os resultados apresentados neste capítulo, calculados com o potencial STLS - de 0.249 e 0.182, respectivamente, para as densidades críticas ($N_c^{1/3}a^*$) do germânio e silício - mostram que as correlações de curto alcance, devidas ao potencial de Coulomb e de troca, são importantes e devem receber tratamento adequado no cálculo de propriedades de impurezas doadoras blindadas em semicondutores de muitos vales. Como podemos observar através da tabela III-3.1, nossos resultados com o potencial STLS, mostram uma boa concordância com os experimentais e são sensivelmente melhores do que os outros resultados teóricos obtidos tanto com o potencial de Thomas-Fermi quanto com o potencial RPA. Isto deixa claro a importância de incorporarmos no modelo de cálculo as correlações de curto alcance e a anisotropia na massa do elétron, especialmente no caso do silício.

CAPÍTULO IV

GENERALIZAÇÃO DA TEORIA STLS PARA SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS.

IV.1- INTRODUÇÃO

Com o recente desenvolvimento da técnica de crescimento de cristais, tornou-se possível preparar microestruturas semicondutoras (heteroestruturas, poços quânticos, super-redes, fios quânticos e pontos quânticos) com dimensões e dopagem determinadas. Os fios quânticos, por exemplo, foram idealizados em 1980 por Sakaki [35] e realizados experimentalmente, em 1982 por Petroff et al. [36]. A idéia original, é a de um gás de elétrons quase unidimensional (GEQ1D), isto é, um gás confinado em "uma dimensão" espacial com o movimento eletrônico quase livre ao longo do comprimento do fio. Devido tanto ao seu interesse fundamental quanto ao seu potencial tecnológico, este sistema vem sendo muito investigado nos últimos anos [11,27,37-46]. Técnicas como litografia ultrafina em conjunto com corrosões químicas seletivas, têm proporcionado a possibilidade de confinarmos o gás de elétrons em quase uma dimensão, que são os chamados fios quânticos, ou mesmo em quase zero dimensão, os chamados pontos quânticos, uma vez que as dimensões destes sistemas são menores (ou comparáveis) ao livre caminho médio dos elétrons. Devido ao confinamento, os estados quânticos são então localizados na direção lateral, modificando as propriedades do GEQ1D. Uma característica importante desse novo sistema, é que sua mobilidade eletrônica é extremamente alta, maior do que nos sistemas eletrônicos bidimensionais. Portanto, as propriedades do GEQ1D sugerem novas aplicações tecnológicas, e pos-

sibilita-nos investigar os efeitos de muitos corpos em um sistema real, com dimensão menor do que 2.

Os efeitos de muitos corpos no GEQ1D vêm sendo, nos últimos anos, sistematicamente investigados tanto do ponto de vista teórico [27,40-43] como experimental [44-47]. Dentre os trabalhos teóricos, muitos deles foram realizados para investigar as propriedades dos plásmons [27,40,42], em fios quânticos e em super-redes de fios [41]. Como a separação usual de energia entre as sub-bandas em um fio quântico é da ordem de meV, a espectroscopia infravermelha distante é uma das principais técnicas experimentais para estudar as excitações eletrônicas no GEQ1D [44,46]. Embora os experimentos realizados [44], demonstrem que o efeito da quantização das sub-bandas é importante para o entendimento do movimento coletivo dos elétrons em fios quânticos, vários estudos, sobre excitações de plásmons, foram realizados sem levar, explicitamente, este efeito em consideração. Dos trabalhos já realizados, que consideraram explicitamente o efeito de multisub-bandas em fios quânticos, a maioria utilizou-se da aproximação RPA onde não se considera as correlações de curto alcance. As correções realizadas em RPA para calcular as propriedades do GEQ1D, no modelo de multisub-bandas, são do tipo Hubbard [39], não autoconsistentes.

Neste capítulo, generalizamos a teoria STLS para incluirmos o modelo de multisub-bandas em fios quânticos retangulares, com poço de potencial quadrado de barreira infinita. Calculamos as excitações de plásmons intra e intersub-bandas, o fator de estrutura, o potencial efetivo e a função de correlação dos pares.

IV.2- FORMULAÇÃO TEÓRICA

Suponhamos o GEQ1D obtido através da técnica de dopagem controlada, de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs onde o elétron está confinado nas direções y e z , por um potencial bidimensional $V(y,z)$, e quase livre na direção do fio quântico (GaAs) com vetor de onda $\vec{k}=(k_x,0,0)$. O potencial do fio quântico, é em princípio, originário da solução autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson com condições de contorno que incluem os efeitos de correlação e de troca. Em 1986, mostrou-se [47] através de cálculos autoconsistentes, que a separação $V(y,z)=V_1(y)+V_2(z)$ é possível desde que, o confinamento na direção lateral y seja muito mais fraco do que na direção z . Em virtude das espessuras típicas das camadas usadas na construção experimental dos fios quânticos, esta é a situação que se verifica. Portanto, nestes sistemas, devido ao confinamento forte na direção z , os níveis discretos de energia nesta direção de confinamento, são bem espaçados tal que, em temperaturas baixas e com densidades eletrônica usual [27,41], podemos considerar apenas a sub-banda mais baixa ocupada, na direção do confinamento em z . Com a finalidade de simplificarmos o problema, supusemos que os elétrons estão confinados no plano $x-y$, em $z=0$. Na direção y , usamos um poço de potencial quadrado ($0<y<L$) de barreira infinita.

A densidade de estados, definida como o número de estados por unidade de energia (dN/dE), de um GEQ1D é dada por

$$D(E) = (2/\hbar\pi) (m/2)^{1/2} \sum_{E_n < E} (E - E_n)^{-1/2} \quad (\text{IV-2.1})$$

onde E_n é a energia do nível n , devido ao confinamento de largura

finita do fio quântico, e m é a massa efetiva do elétron. Como dissemos na seção IV.1, se a densidade eletrônica e a temperatura forem suficientemente baixas ($k_B T \ll E_2 - E_1$), apenas a sub-banda mais baixa é ocupada, e a equação (IV-2.1) pode ser simplificada ($E_0 = 0$):

$$D(E) = (2/\hbar\pi) (m/2)^{1/2} E^{-1/2}. \quad (\text{IV-2.2})$$

Através de (IV-2.1), podemos notar que a densidade de estados do GEQ1D tem uma singularidade em $E = E_n$. Nos sistemas eletrônicos 3D e 2D, a densidade de estados é proporcional a $E^{1/2}$ e E^0 , respectivamente. Desde que muitas quantidades físicas estão relacionadas com a densidade de estados, muitas vezes é preciso tratarmos com a singularidade em $D(E)$ e, se necessário, escolhermos uma simplificação plausível para o modelo teórico do GEQ1D. Em sistemas reais, esperamos uma certa desordem devido à distribuição aleatória das impurezas no sistema que tem como efeito suavizar a singularidade de $D(E)$ em (IV-2.1). Fenomenologicamente, o alargamento pode ser caracterizado por um parâmetro, $\gamma = \hbar/\tau$, onde τ é o tempo de vida do espalhamento de partícula única.

Em um gás de elétrons estritamente unidimensional, isto é de largura zero, a transformada de Fourier da interação de Coulomb,

$$V^C(x, x') = \frac{e^2}{\epsilon |x - x'|}, \quad (\text{IV-2.3})$$

é divergente. Entretanto, se considerarmos um modelo mais realístico, largura finita, a transformada de Fourier da interação Coulombiana,

$$V^c(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^2}{\epsilon \left[(x-x')^2 + (y-y')^2 \right]^{1/2}}, \quad (\text{IV-2.4})$$

é dada por

$$U^c(q_x, y-y') = \frac{2e^2}{\epsilon} K_0(|q_x(y-y')|), \quad (\text{IV-2.5})$$

onde $K_0(x)$ é a função modificada de Bessel de segunda espécie de ordem zero, q_x é o vetor de onda do elétron na direção x e ϵ é a constante dielétrica do semiconductor.

Assim, os elementos de matriz da interação de Coulomb são finitos para vetores de onda finitos e são calculados como:

$$\begin{aligned} V_{ij\ell m}^c(q_x) &= \int dy \int dy' \phi_i^*(y) \phi_j(y) U^c(q_x, y-y') \phi_\ell^*(y') \phi_m(y') \\ &= \frac{2e^2}{\epsilon} \int_0^\infty dk \frac{F_{ij\ell m}(k, q_x)}{(k^2 + q_x^2)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (\text{IV-2.6})$$

onde

$$\begin{aligned} F_{ij\ell m}(k, q_x) &= \int d\eta \int d\eta' \phi_i^*(\eta) \phi_j(\eta) \\ &\times \exp[-(k^2 + q_x^2)^{1/2} |\eta - \eta'|] \phi_\ell^*(\eta') \phi_m(\eta') \end{aligned} \quad (\text{IV-2.7})$$

é denominado fator de forma - leva em consideração a largura finita do fio quântico. Os índices $ij\ell m$ representam as correspondentes sub-bandas para o movimento dos elétrons e $\phi_i(y)$ é a função de onda do i -ésimo nível na direção y . O potencial de interação, dado pela equação (IV-2.6), indica que um elétron no estado j é espa-

lhado para um estado i enquanto um outro elétron no estado m é espalhado para um estado l .

O fator de estrutura estático é dado por

$$S_{ij\ell m}(q_x) = \int_0^\infty d\omega S_{ij\ell m}(q_x, \omega), \quad (\text{IV-2.8})$$

onde o fator de estrutura dinâmico, $S_{ij\ell m}(q_x, \omega)$, é relacionado com a susceptibilidade generalizada através de:

$$S_{ij\ell m}(q_x) = - \frac{\hbar}{\pi \rho} \text{Im } \chi_{ij\ell m}(q_x, \omega), \quad (\text{IV-2.9})$$

onde $\rho=1/L_x$ é a densidade eletrônica unidimensional do sistema. No modelo de multisub-bandas, definimos a susceptibilidade generalizada do GEQ1D como

$$\chi_{ij\ell m}(q_x, \omega) = \frac{\chi_{\ell m}(q_x, \omega)}{\delta_{il} \delta_{jm} - \Psi_{ij\ell m}(q_x) \chi_{\ell m}(q_x, \omega)} \quad (\text{IV-2.10})$$

onde $\chi_{\ell m}=P_{\ell m}$ se $\ell=m$, $\chi_{\ell m}=P_{\ell m}+P_{m\ell}$ quando $\ell \neq m$, δ_{ij} é o delta de Kronecker,

$$P_{\ell m}(q_x, \omega) = \frac{2}{L_x} \sum_{K_x} \frac{n_F(\epsilon_m(k_x)) - n_F(\epsilon_\ell(k_x + q_x))}{\hbar(\omega + i\delta) + (\epsilon_m(k_x)) - (\epsilon_\ell(k_x + q_x))}, \quad (\text{IV-2.11})$$

é a função de polarização do GEQ1D, na aproximação RPA e

$$\Psi_{ij\ell m}(q_x) = \left(1 - G_{ij\ell m}(q_x)\right) V_{ij\ell m}^c(q_x) \quad (\text{IV-2.12})$$

é o potencial efetivo autoconsistente,

$$G_{ij\ell m}(q_x) = -\frac{1}{\pi \rho q_x V_{ij\ell m}^c(q_x)} \int_0^\infty dq'_x q'_x V_{ij\ell m}^c(q'_x) [S_{ij\ell m}(q_x - q'_x) - 1] \quad (\text{IV-2.13})$$

é a correção de campo local. Se fizermos $G_{ij\ell m}(q_x) = 0$, em (IV.2.12), temos $\psi_{ij\ell m}(q_x) = V_{ij\ell m}^c(q_x)$. Por outro lado, se considerarmos $i=j=\ell=m=0$, recaímos numa equação do tipo (II-5.16), para o caso do GEQ1D, onde se considera o modelo de apenas uma sub-banda.

As equações (IV-2.8), (IV-2.10) e (IV-2.13) constituem o conjunto de equações para ser resolvido autoconsistentemente.

A função de correlação dos pares, $g(x)$, é obtida através da equação

$$g_{ij\ell m}(x) = 1 + \frac{1}{\pi \rho} \int_0^\infty dq_x [S_{ij\ell m}(q_x) - 1] \cos(q_x x), \quad (\text{IV-2.14})$$

usando-se o fator de estrutura autoconsistente.

IV-3. RESULTADOS

Para obtermos as propriedades do GEQ1D, resolvemos numericamente o conjunto de equações autoconsistentes - [(IV-2.8), (IV.2.10), (IV-2.13)] - utilizando o modelo de duas e três sub-bandas. Determinamos o fator de estrutura - $S_{ij\ell m}(q_x)$ -, o potencial efetivo - $\psi_{ij\ell m}(q_x)$ -, a relação de dispersão de plásmons - $\omega(q_x)$ - e a função de correlação dos pares - $g_{ij\ell m}(q_x)$ - para diferentes larguras (L) e para várias densidades (ρ). O espectro das excitações coletivas é obtido dos pólos da parte imaginária da susceptibilidade generalizada, representada pela equação (IV-2.10).

IV-3.1. MODELO DE DUAS SUB-BANDAS COM APENAS UMA OCUPADA

Nesta seção, apresentaremos os resultados para as oscilações de plásmons, o potencial efetivo, o fator de estrutura e a função de correlação dos pares no modelo de duas sub-bandas, considerando somente a sub-banda mais baixa ocupada. As relações de dispersão de plásmons, obtidas a partir dos pólos da parte imaginária da susceptibilidade generalizada, no modelo de duas sub-bandas, onde somente a primeira sub-banda é ocupada, são dadas por:

$$1 - \Psi_{0000} \chi_{00} = 0 \quad (\text{IV-3.1.1})$$

e

$$1 - \Psi_{1010} \chi_{10} = 0, \quad (\text{IV-3.1.2})$$

onde os índices zero (0) e um (1) representam, respectivamente, a primeira e a segunda sub-banda.

Na figura IV-3.1a, mostramos a excitações de plásmons da primeira sub-banda - intrasub-banda (0-0), em unidades de Rydberg efetivo, $R_y^* = me^4 / 2\epsilon\hbar^2$, como função do vetor de onda adimensional ($q_x a^*$), onde a^* é o raio de Bohr efetivo: $a^* = \epsilon\hbar^2 / me^2$. Utilizamos um fio quântico de GaAs/AlGaAs onde os elétrons com densidade $\rho = 3,27 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ estão confinados por um poço de potencial de largura $L = 30 \text{ nm}$. Com estes parâmetros e para estas heteroestruturas semicondutoras, apenas uma sub-banda é ocupada. Podemos observar, através da figura IV-3.1a, que os efeitos devido à correção de campo local são significativos e não podem ser desprezados.

Na figura IV-3.1b, mostramos a relação de dispersão en-

FIGURA IV-3.1a - Relação de dispersão intra-sub-banda da sub-banda mais baixa calculada de acordo com o modelo de duas sub-bandas, com apenas uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada representa o espectro de excitação intrasub-banda de partícula única. Os parâmetros e as constantes (GaAs) usados no cálculo foram: $L=30\text{nm}$, $\rho=3.27 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$, $m=0.067m_e$ e $\epsilon=12.9$.

FIGURA IV-3.1b - Excitações coletivas intersub-bandas, entre a primeira e a segunda sub-banda, calculadas no modelo de duas sub-bandas, com somente uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada corresponde ao espectro de excitação intersub-bandas de partícula única. Os parâmetros e as constantes utilizados foram iguais aos da figura (IV-3.1a).

tre a primeira e a segunda sub-bandas - intersub-bandas (1-0), no modelo de duas sub-bandas, considerando apenas a primeira sub-banda ocupada e utilizando os mesmos parâmetros da figura IV-3.1a. A partir da figura IV.3.1b, observamos, além dos efeitos das correções de campo local, realizadas em RPA, que há uma depolarização: para $q_x=0$, a frequência das excitações coletivas é 18% maior do que a excitação de partícula única.

Nas figuras IV-3.1c, IV-3.1d e IV-3.1e, mostramos, respectivamente, o potencial efetivo, o fator de estrutura e a função de correlação dos pares determinados para a sub-banda mais baixa, utilizando os mesmos parâmetros das figuras IV-3.1a e IV-3.1b, para fios quânticos de três larguras diferentes: 30nm, 50nm e 100nm. Os resultados obtidos com a aproximação RPA também são apresentados. Da figura IV-3.1c, vemos nitidamente que os efeitos das correlações de curto alcance provocam uma blindagem mais acentuada no potencial STLS. Notamos também, a partir da figura IV.3.1e, que a função de correlação dos pares na aproximação RPA, em $x=0$, é negativa para fios quânticos de larguras, 30nm e 50nm, e que os resultados determinados com a aproximação STLS são positivos para todas as larguras calculadas. Finalmente, notamos ainda que, à medida que aumentamos a espessura das camadas, os nossos resultados vão se aproximando daqueles obtidos com a aproximação RPA, significando que, os efeitos das correlações de curto alcance vão diminuindo à medida que aumentamos a espessura dos fios quânticos. Isto ocorre porque, aumentando a largura L do poço de potencial do fio quântico e mantendo a densidade linear ρ , constante, haverá uma menor superposição das funções de onda eletrônicas e, conseqüentemente, os efeitos das correlações de curto alcance decrescem.

FIGURA IV-3.1c - Potencial efetivo, elétron-elétron, da sub-banda mais baixa, calculado com o modelo STLS generalizado, para fios quânticos de GaAs de diferentes espessuras, com a mesma densidade utilizada na figura (IV-3.1a). Os resultados obtidos com a aproximação RPA também são apresentados.

FIGURA IV-3.1d - Fator de estrutura do gás de elétrons quase unidimensional de um fio quântico de GaAs, com a densidade utilizada na figura (IV-3.1a), onde apenas a primeira sub-banda é ocupada. Diferenças, relativamente grandes, são observadas entre as aproximações RPA e STLS, principalmente quando consideramos fios quânticos com $L=30\text{nm}$.

FIGURA IV-3.1e - Função de correlação dos pares para sistemas eletrônicos quase unidimensionais, com as mesmas características dos utilizados na figura anterior, onde apenas a sub-banda mais baixa é ocupada por elétrons. Os resultados obtidos com a aproximação RPA são também apresentados. Notamos que para todas as espessuras calculadas, a aproximação STLS mostra-se mais satisfatória.

IV-3.2. MODELO DE DUAS SUB-BANDAS COM DUAS OCUPADAS

Nesta seção, apresentaremos os resultados para as oscilações de plásmons, o potencial efetivo e o fator de estrutura no modelo de duas sub-bandas, considerando as duas sub-bandas ocupadas. Neste caso, as relações de dispersão de plásmons são dadas por [27,41]:

$$(1 - \Psi_{0000} \chi_{00})(1 - \Psi_{1111} \chi_{11}) - \Psi_{1100}^2 \chi_{00} \chi_{11} = 0, \quad (\text{IV-3.2.1})$$

para os modos simétricos e,

$$1 - \Psi_{1010} \chi_{10} = 0, \quad (\text{IV-3.2.2})$$

para os modos antissimétricos.

Olhando para a equação (IV-3.2.1), percebemos que se o seu último termo for suficientemente pequeno, comparado com os outros termos da equação, podemos então desprezá-lo e por conseguinte desacoplar a equação (IV-3.2.1), em:

$$1 - \Psi_{0000} \chi_{00} = 0 \quad (\text{IV-3.2.3})$$

e

$$1 - \Psi_{1111} \chi_{11} = 0, \quad (\text{IV-3.2.4})$$

recaindo, assim, em equações análogas àquelas já obtidas na seção IV-3.1, onde apenas a sub-banda mais baixa é ocupada. Com o intuito de verificar se essa hipótese era plausível, realizamos os

cálculos na aproximação RPA, com a equação (IV-3.2.1) e com as equações desacopladas: (IV-3.2.3) e (IV-3.2.4). Constatamos que, de fato, não existe diferença perceptível entre os resultados - veja a figura (IV-3.2a). Deste modo, as relações de dispersão, no modelo de duas sub-bandas - com duas sub-bandas ocupadas - continuam a ser extraídas dos pólos da parte imaginária da susceptibilidade generalizada, definida pela equação (IV-2.10).

Nas figuras (IV-3.2b) e (IV-3.2c), mostramos, respectivamente, os resultados para as excitações de plásmons: da primeira e da segunda intra-sub-bandas, (0-0) e (1-1), e para as intersub-bandas (1-0). Utilizamos um fio quântico de 100nm de espessura, com densidade eletrônica $\rho=4.9 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Notamos através das figuras (IV-3.2b) e (IV-3.2c) que, embora a diferença entre os nossos resultados e os obtidos com a aproximação RPA seja menor do que aqueles obtidos com fios quânticos de 30nm, calculados na seção IV-3.1, as correções de campo local são ainda perceptíveis.

Nas figuras (IV-3.2d), (IV-3.2e) e (IV-3.2f) mostramos, respectivamente: o potencial efetivo $\Psi_{1111}(q_x a^*)$, da segunda sub-banda, o fator de estrutura $S_{1010}(q_x a^*)$, das intersub-bandas (1-0), e o fator de estrutura $S_T(q_x a^*)=S_{0000}(q_x a^*)+S_{1111}(q_x a^*)$, das intra-sub-bandas (0-0) e (1-1). Como na seção IV-3.1, notamos, a partir da figura (IV-3.2d), que os efeitos de blindagens na aproximação STLS são mais significativos que na aproximação RPA. O fator de estrutura $S_T(q_x a^*)$ tem um comportamento similar ao calculado para a sub-banda mais baixa quando consideramos o modelo de duas sub-bandas, com apenas uma sub-banda ocupada - veja a figura (IV-3.1d). Na figura (IV-3.2e) observamos que o fator de estrutura não é igual a zero para $q_x=0$. Isto se deve ao fato de que as frequências de plásmons não são nulas em $q_x=0$.

FIGURA IV-3.2a - Relação de dispersão de plásmons, na aproximação RPA, calculadas com a equação (IV-3.2.1), onde os modos são acoplados, e com as equações (IV-3.2.3) e (IV-3.2.4) onde os modos foram desacoplados. Como já salientamos, praticamente não há diferença entre os dois resultados: as linhas pontilhadas e tracejadas correspondem aos modos acoplados enquanto que as linhas contínuas correspondem aos modos desacoplados.

FIGURA IV-3.2b - Relação de dispersão de plasma intra-sub-banda, primeira e segunda sub-bandas, de acordo com o modelo de duas sub-bandas, onde duas sub-bandas são ocupadas. As duas linhas superiores correspondem ao estado fundamental e as duas inferiores ao primeiro estado excitado. Os parâmetros usados no cálculo foram: $L=100\text{nm}$, $\rho=4.9 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e as constantes do material, GaAs.

FIGURA IV-3.2c - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0), calculadas no modelo de duas sub-bandas, com duas sub-bandas ocupadas. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha pontilhada à aproximação STLS. Os parâmetros e as constantes do material são os mesmos da figura (IV-3.1a).

FIGURA IV-3.2d - Potencial efetivo da segunda sub-banda, $\Psi_{1111}(q_x a^*)$, calculado com a aproximação STLS generalizada, para fios quânticos de GaAs com $L=100\text{nm}$ e $\rho=4.9 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. O resultado obtido com a aproximação RPA também é apresentado para comparação.

FIGURA IV-3.2e - Fator de estrutura do gás de elétrons quase unidimensional para um fio quântico de GaAs ($\rho=4.9 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e $L=100 \text{ nm}$), considerando espalhamentos intersub-bandas, no modelo de duas sub-bandas, com duas sub-bandas ocupadas. A linha pontilhada corresponde à aproximação STLS e a linha tracejada à aproximação RPA.

FIGURA IV-3.2f - Fator de estrutura do gás de elétrons quase unidimensional em um fio quântico de GaAs ($\rho=4.9 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e $L=100 \text{ nm}$), considerando espalhamentos intra-sub-bandas: (0-0) e (1-1), no modelo de duas sub-bandas, com duas sub-bandas ocupadas. O fator de estrutura total, representado pela linha superior contínua, é obtido pela soma do fator de estrutura da segunda sub-banda, representado pela linha inferior, e o fator de estrutura da sub-banda mais baixa, representado pela linha intermediária.

IV-3.3. MODELO DE TRÊS SUB-BANDAS COM APENAS UMA OCUPADA

Nesta seção, apresentaremos os resultados para as oscilações de plásmons intra e intersub-bandas e o potencial efetivo das intersub-bandas: (1-0) e (2-0), no modelo de três sub-bandas, considerando apenas uma sub-banda ocupada. As relações de dispersão de plásmons, neste modelo, são dadas [27,41] por:

$$(1 - \Psi_{0000} \chi_{00})(1 - \Psi_{2020} \chi_{20}) - \Psi_{2000}^2 \chi_{00} \chi_{20} = 0, \quad (\text{IV-3.3.1})$$

para os modos simétricos, onde o índice (2) representa a terceira sub-banda e,

$$1 - \Psi_{1010} \chi_{10} = 0, \quad (\text{IV-3.3.2})$$

para os modos antissimétricos.

A equação (IV-3.3.1), será desacoplada em

$$1 - \Psi_{0000} \chi_{00} = 0 \quad (\text{IV-3.3.3})$$

e

$$1 - \Psi_{2020} \chi_{20} = 0, \quad (\text{IV-3.3.4})$$

pelas mesmas razões que nos levaram a desacoplar a equação (IV-3.2.1), isto é, porque o seu último termo é muito menor do que os outros termos da equação - veja a figura (IV-3.3a, onde comparamos os resultados, calculados com a equação (IV-3.3.1) e com as equações desacopladas, (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4). Vemos assim que,

FIGURA IV-3.3a - Curvas de dispersão das excitações de plásmons, na aproximação RPA, calculadas, com a equação (IV-3.3.1), onde os modos são acoplados, e com as equações (IV.3.3.3) e (IV-3.3.4) onde os modos foram desacoplados. Como já afirmamos, praticamente não há diferença entre os dois resultados: as linhas pontilhadas e tracejadas correspondem aos modos acoplados enquanto que as linhas cheias correspondem aos modos desacoplados.

no modelo de três sub-bandas com apenas uma sub-banda ocupada, as relações de dispersão de plásmons poderão ser também determinadas dos pólos da parte imaginária da equação definida em (IV-2.10).

Na figura (IV-3.3b) mostramos os resultados para as excitações de plásmons calculadas com as equações (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4). Já na figura (IV-3.3c), apresentamos os resultados obtidos com a equação (IV-3.3.2). Utilizamos um fio quântico de 100nm de espessura, com densidade eletrônica $\rho=2.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Notamos, através das figuras (IV-3.3b) e (IV-3.3c), que as curvas de dispersão na aproximação STLS, estão sempre abaixo das obtidas com a aproximação RPA, devido aos efeitos da correção de campo local.

Nas figuras (IV-3.2d) e (IV-3.2e) mostramos, respectivamente, o potencial efetivo intersub-bandas: $\Psi_{1010}(q_x a^*)$ e $\Psi_{2020}(q_x a^*)$, para fios quânticos de 50nm e 100nm, com a mesma densidade usada na figura (IV-3.3b). Podemos notar, a partir das figuras (IV-3.3b) e (IV-3.3c), que para fios quânticos mais espessos o potencial é menos repulsivo.

FIGURA IV-3.3b - Curvas de dispersão das excitações coletivas calculadas com as equações desacopladas (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4), no modelo de três sub-bandas, onde apenas uma sub-banda é ocupada. As duas linhas tracejadas correspondem à aproximação RPA e as linhas contínuas à aproximação STLS. As áreas hachuradas correspondem ao espectro de excitação de partícula única. Os parâmetros usados no cálculo foram, $L=100\text{nm}$ e $\rho=2.5 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ e as constantes do GaAs.

FIGURA IV-3.3c - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0), calculadas no modelo de três sub-bandas, com apenas uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada corresponde ao espectro de excitação intersub-bandas de partícula única. Os parâmetros e as constantes do material são os mesmos da figura IV-3.3b.

FIGURA IV-3.3d - Potencial efetivo intersub-bandas $\Psi_{1010}(q_x a^*)$, calculado com a aproximação STLS generalizada, para fios quânticos de GaAs de duas larguras: 50nm e 100nm. Os resultados obtidos com a aproximação RPA também são apresentados para comparação.

FIGURA IV-3.3e - Potencial efetivo intersub-bandas $\Psi_{2020}(q_x a^*)$, determinado com a aproximação STLS generalizada, para fios quânticos de GaAs de duas larguras: 50nm e 100nm. Os resultados obtidos com a aproximação RPA também são apresentados para comparação.

IV-4. CONCLUSÕES

Nossos resultados demonstram que, em sistemas eletrônicos quase unidimensionais, no modelo de várias sub-bandas, os efeitos de troca (exchange) e correlação são importantes e não devem ser ignorados. Observamos que, para todas as larguras (L) calculadas: (30nm, 50nm e 100nm), existem diferenças significativas entre os resultados obtidos com as aproximações RPA e STLS - mostrando claramente a importância dos efeitos das correlações de curto alcance. Notamos que quando consideramos o modelo de várias sub-bandas, os modos correspondentes às excitações intersub-bandas são observados e, que, as correções de campo local são mais pronunciadas no regime de densidades eletrônicas intermediárias e baixa. Observamos ainda que, à medida que aumentamos a largura do fio quântico, os efeitos devido às correlações de curto alcance tornam-se menos importantes. Isto acontece porque, aumentando a largura L do poço quântico e mantendo a densidade linear ρ , constante, haverá uma menor superposição das funções de onda eletrônicas e, por conseguinte, os efeitos oriundos das correções de campo local decrescem.

CAPÍTULO V

TEORIA STLS GENERALIZADA APLICADA AO GEQ1D COM POTENCIAL DE CONFINAMENTO PARABÓLICO.

V.1- INTRODUÇÃO

Como dissemos no capítulo anterior, o GEQ1D é usualmente obtido, a partir do gás de elétrons bidimensional (GE2D), com técnicas de ataque químico seletivo, litografia ultrafina ou por diferença de voltagem (gating) e, que, devido ao confinamento adicional, os elétrons são quase livres apenas em uma direção, tendo mobilidade extremamente alta. Indubitavelmente, um dos maiores estímulos à investigação do GEQ1D é o seu potencial de aplicações tecnológicas. A justificativa para isto, é que no regime de baixa energia - comparada com a diferença de energia entre as sub-bandas -, há uma forte redução no mecanismo de espalhamento, tornando o livre caminho médio inelástico muito grande. As heteroestruturas de GaAs/AlGaAs, são sistemas prediletos para investigação experimental, porque nestas microestruturas, os elétrons têm massa efetiva pequena e tempo de vida longo. A redução dos processos de espalhamento, bem como a conservação da fase, por longas distâncias, conduzem a uma infinidade de informações fundamentais a respeito dos aspectos de transporte e de confinamento eletrônico, nestas estruturas artificiais [41,51].

O entendimento dessa nova física, tais como os fenômenos de transporte e os processos básicos de dopagem, nessas estruturas de baixa dimensionalidade, continuarão sendo objeto de

investigação intensa, nos próximos anos.

Neste capítulo, utilizando a teoria STLS generalizada, daremos continuidade à investigação dos efeitos de muitos corpos, nas propriedades do GEQ1D. Iremos substituir o potencial quadrado ($0 < y < L$) de barreira infinita utilizado no capítulo anterior, para o confinamento na direção y , por um potencial de confinamento parabólico [40]. Na direção z , devido ao fato dos níveis discretos de energia serem bem espaçados, supusemos, como anteriormente, que os elétrons têm seu movimento restrito ao plano $z=0$. Calculamos e apresentamos resultados para as excitações de plásmons intra e intersub-bandas, o fator de estrutura, o potencial efetivo auto-consistente e a função de correlação dos pares. Realizamos uma comparação com os resultados obtidos anteriormente.

V.2- FORMULAÇÃO TEÓRICA

Basicamente o que será alterado neste capítulo, em relação ao anterior, é o potencial de confinamento na direção lateral y . Nesta direção, o potencial de confinamento será parabólico:

$$V(y) = -\frac{m \Omega^2}{2} y^2. \quad (V-2.1)$$

Com este potencial, as funções de onda de confinamento,

$$\phi_\ell(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{\pi(\ell+1)}{L} y \right], \quad (V-2.2)$$

do poço quadrado de barreira infinita, na direção y , serão agora substituídas, na equação (IV-2.6), por

$$\phi_{\ell}(y) = \frac{1}{\left[2^{\ell} \ell! \sqrt{\pi} l_{\Omega}\right]^{1/2}} e^{-\frac{y^2}{2l_{\Omega}}} H_{\ell}\left(\frac{y}{l_{\Omega}}\right) \quad (\text{V-2.3})$$

onde $H_{\ell}(x)$ são os polinômios de Hermite e $l_{\Omega} = \left(\frac{\hbar}{m\Omega}\right)^{1/2}$.

Assim, os elementos de matriz da interação de Coulomb calculados por

$$\begin{aligned} V_{ij\ell m}^c(q_x) &= \int dy \int dy' \phi_i^*(y) \phi_j(y) U^c(q_x, y-y') \phi_{\ell}^*(y') \phi_m(y') \\ &= \frac{2e^2}{\varepsilon} \int_0^{\infty} dk \frac{F_{ij\ell m}(k, q_x)}{(k^2 + q_x^2)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (\text{V-2.4})$$

possuem um fator de forma,

$$\begin{aligned} F_{ij\ell m}(k, q_x) &= \int d\eta \int d\eta' \phi_i^*(\eta) \phi_j(\eta) \\ &\times \exp[-(k^2 + q_x^2)^{1/2} |\eta - \eta'|] \phi_{\ell}^*(\eta') \phi_m(\eta'), \end{aligned} \quad (\text{V-2.5})$$

diferente. As grandezas: $U^c(q_x, y-y')$, q_x , ε e os índices $ij\ell m$, têm os mesmos significados, definidos na seção IV.2.

O fator de estrutura estático,

$$S_{ij\ell m}(q_x) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \chi_{ij\ell m}(q_x, \omega), \quad (\text{V-2.6})$$

a susceptibilidade generalizada,

$$\chi_{ij\ell m}(q_x, \omega) = \frac{\chi_{\ell m}(q_x, \omega)}{\delta_{il} \delta_{jm} - \Psi_{ij\ell m}(q_x) \chi_{\ell m}(q_x, \omega)}, \quad (V-2.7)$$

o potencial efetivo autoconsistente,

$$\Psi_{ij\ell m}(q_x) = \left(1 - G_{ij\ell m}(q_x)\right) V_{ij\ell m}^c(q_x), \quad (V-2.8)$$

onde

$$G_{ij\ell m}(q_x) = -\frac{1}{\pi \rho q_x V_{ij\ell m}^c(q_x)} \int_0^\infty dq'_x q'_x V_{ij\ell m}^c(q'_x) \left[S_{ij\ell m}(q_x - q'_x) - 1 \right] \quad (V-2.9)$$

e a função de correlação dos pares,

$$g_{ij\ell m}(x) = 1 + \frac{1}{\pi \rho} \int_0^\infty dq_x \left[S_{ij\ell m}(q_x) - 1 \right] \cos(q_x x), \quad (V-2.10)$$

guardam a mesma estrutura e os mesmos significados às suas correspondentes do capítulo IV - veja a seção (IV.2). Se fizermos $G_{ij\ell m}(q_x) = 0$, a aproximação RPA é reestabelecida (onde as correções de campo local não são consideradas). Se por outro lado, considerarmos $i=j=\ell=m=0$, recaímos no caso do GEQ1D, onde se considera o modelo de apenas uma sub-banda.

O conjunto de equações, [(V-2.6), (V-2.7) e (V-2.8)] é, então, resolvido autoconsistentemente.

V-3. RESULTADOS

Para resolvemos numericamente o conjunto de equações autocosistentes com o intuito de obtermos as propriedades

do GEQ1D, utilizando o modelo de duas e três sub-bandas, realizamos as devidas modificações no programa computacional, elaborado para determinarmos as propriedades do GEQ1D, com potencial quadrado de barreira infinita. Determinamos, como no capítulo IV, o fator de estrutura, o potencial efetivo, a função de correlação dos pares e a relação de dispersão de plásmons para várias diferenças de energia e para diferentes densidades eletrônicas. O espectro das excitações coletivas é obtido dos pólos da parte imaginária da susceptibilidade generalizada - equação (V-2.7).

V-3.1. MODELO DE DUAS SUB-BANDAS COM APENAS UMA OCUPADA

Apresentaremos nesta seção, os resultados para as oscilações coletivas, o potencial efetivo, o fator de estrutura e a função de correlação dos pares no modelo de duas sub-bandas, considerando apenas uma sub-banda ocupada. As relações de dispersão, obtidas a partir dos pólos da parte imaginária da susceptibilidade generalizada, são dadas pelas equações (IV-3.1.1) e (IV-3.1.2).

Nas figuras V-3.1a e V-3.1b, mostramos a energia de plásmons da primeira sub-banda, em unidades de R_y^* como função do vetor de onda, ao longo do comprimento do fio ($q_x a^*$). Utilizamos fios quânticos, com densidade linear $\rho = 2.45 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, onde os elétrons são confinados por um poço de potencial parabólico com diferenças de energia entre as sub-bandas de $\hbar\Omega = 1.7 \text{ meV}$ e $\hbar\Omega = 6.8 \text{ meV}$, as quais, são, respectivamente, iguais as diferenças de energia entre a segunda e a primeira sub-bandas de fios quânticos retangulares de larguras $L = 100 \text{ nm}$ e $L = 50 \text{ nm}$. Com estes parâmetros, apenas uma sub-banda é ocupada. Podemos observar, através das fi-

FIGURA V-3.1a - Relação de dispersão de plasma intra-sub-banda (0-0), calculada para um fio quântico parabólico com diferença de energia entre as sub-bandas de $\hbar\Omega=6.8\text{meV}$ e com densidade $\rho=2.45\times 10^5\text{cm}^{-1}$, de acordo com o modelo de duas sub-bandas, com apenas uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada corresponde ao espectro de excitação intrasub-banda de partícula única.

FIGURA V-3.1b - Relação de dispersão das excitações coletivas intra-sub-banda (0-0) calculada para um fio quântico parabólico com diferença de energia entre as sub-bandas de $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$, de acordo com o mesmo modelo utilizado no gráfico V-3.1a e com a mesma densidade. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada representa o espectro de excitação intrasub-banda de partícula única.

guras, que os efeitos devido às correlações são significativos e não podem ser ignorados.

Nas figuras V-3.1c e V-3.1d, mostramos as curvas de dispersão das excitações coletivas intersub-bandas - entre a primeira e a segunda sub-bandas no modelo de duas sub-bandas, com os mesmos parâmetros utilizados nas figuras V-3.1a e V-3.1b, respectivamente. A partir das figuras V-3.1c e V-3.1d, observamos um comportamento similar àquele observado na figura IV-3-1b, onde a depolarização decresce quando as correlações são consideradas.

Nas figuras V-3.1e, V-3.1f e V-3.1g, mostramos, respectivamente, o potencial efetivo, o fator de estrutura e a função de correlação dos pares determinados para a sub-banda mais baixa, com fios quânticos iguais aos utilizados nas figuras anteriores e com a mesma densidade. Com o intuito de avaliar os nossos resultados, os cálculos com a aproximação RPA estão sendo também apresentados. Da figura V-3.1e, vemos nitidamente que os efeitos de blindagens no potencial STLS são mais pronunciados do que no potencial RPA. Notamos também, a partir da figura V-3.1g, que a função de correlação dos pares na aproximação RPA, em $x=0$, é negativa nos dois resultados apresentados, o que não se verifica com os resultados determinados com a aproximação STLS. Notamos ainda, observando as figuras anteriores: V-3.1a,...V-3.1f, que quando diminuimos a separação entre as sub-bandas, a diferença entre os nossos resultados e aqueles obtidos com a aproximação RPA diminui.

FIGURA V-3.1c - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0) para um fio quântico com as mesmas características daquele utilizado na figura V-3.1a, calculadas no modelo de duas sub-bandas, com apenas a primeira sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada representa o espectro de excitação intersub-banda de partícula única.

FIGURA V-3.1d - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0) para um fio quântico com características iguais ao utilizado na figura V-3.1b, calculadas no modelo de duas sub-bandas, com somente uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada representa o espectro de excitação intersub-banda de partícula única.

FIGURA V-3.1e - Potencial efetivo intra-sub-banda $\Psi_{0000}(q_x a^*)$, calculado com o modelo STLS generalizado, para fios quânticos parabólicos com separação de energia entre os sub-níveis diferentes: $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$ e $\hbar\Omega=6.8\text{meV}$. Os resultados obtidos com a aproximação RPA também são apresentados.

FIGURA V-3.1f - Fator de estrutura do gás de elétrons quase unidimensional para fios quânticos parabólicos com características iguais aos da figura V-3.1e, onde apenas a primeira sub-banda é ocupada. Diferenças, relativamente grandes, são observadas entre as aproximações RPA e STLS, principalmente para fios quânticos onde a diferença de energia entre os sub-níveis é maior.

FIGURA V-3.1g - Função de correlação dos pares para fios quânticos parabólicos, com características iguais aos da figura V-3.1f, onde apenas a sub-banda mais baixa é ocupada por elétrons. Os resultados obtidos com a aproximação RPA são também apresentados. Notamos que para as duas separações de energias calculadas: $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$ e $\hbar\Omega=6.8\text{meV}$, a aproximação STLS mostra-se mais satisfatória que a aproximação RPA.

V-3.2. MODELO DE DUAS SUB-BANDAS COM DUAS OCUPADAS

Nesta seção, apresentaremos os resultados para as oscilações de plásmons e o potencial efetivo no modelo de duas sub-bandas, considerando duas as sub-bandas ocupadas. As relações de plásmons para os modos simétricos serão calculadas pelas equações desacopladas: (IV-3.2.3) e (IV-3.2.4), embora, neste caso, a aproximação não seja tão boa quanto no caso do potencial retangular - veja seção IV-3.2. Os modos antissimétricos, serão determinados sem nenhuma aproximação, pela equação (IV-3.2.3).

Na figura V-3.2a mostramos, os potenciais efetivos intra-sub-bandas: $\Psi_{0000}(q_x a^*)$ e $\Psi_{1111}(q_x a^*)$, para confinamento parabólico, com separação de energia entre as sub-bandas de $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$ e com densidade $\rho=4.9\times 10^5\text{cm}^{-1}$. Notamos, a partir da figura V-3.2a, que o potencial na primeira sub-banda $\Psi_{0000}(q_x a^*)$, é mais repulsivo do que o potencial na segunda sub-banda $\Psi_{1111}(q_x a^*)$.

Com o objetivo de comparar os cálculos realizados para fios quânticos retangulares e parabólicos, mostramos nas figuras V-3.2b e V-3.2c, os resultados para as curvas de dispersão das excitações coletivas, no modelo de duas sub-bandas, com a mesma densidade utilizada na figura V-3.2a. Na figura V-3.2b, mostramos os resultados para a energia de plásmons intra-sub-banda, da segunda sub-banda onde as linhas contínuas representam os resultados com o fio quântico retangular ($L=100\text{nm}$) enquanto que as linhas pontilhadas e tracejadas, representam os cálculos com o fio quântico parabólico, cuja diferença de energia entre as sub-bandas, consideramos igual a diferença de energia entre a primeira e a segunda sub-bandas de um fio quântico retangular de largura $L=100\text{nm}$: $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$. Notamos que existe diferenças relativamente

FIGURA V-3.2a - Potencial efetivo intra-sub-bandas, de interação entre os elétrons, calculados com a aproximação STLS generalizada, para fios quânticos parabólicos, com separação de energia entre as sub-bandas de $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$ e com densidade $\rho=4.9\times 10^5\text{cm}^{-1}$. As linhas contínuas correspondem ao potencial $\Psi_{1111}(q_x a^*)$, e as linhas pontilhadas e tracejadas correspondem ao potencial $\Psi_{0000}(q_x a^*)$.

FIGURA V-3.2b - Relação de dispersão das excitações coletivas intra-sub-banda (1-1), para fios quânticos: parabólico, com separação entre os sub-níveis de $\hbar\Omega=1.7\text{meV}$, e retangular de largura $L=100\text{nm}$, com densidade $\rho=4.9\times 10^5\text{cm}^{-1}$. As duas linhas superiores: pontilhadas e tracejadas, correspondem ao confinamento parabólico e as duas inferiores contínuas, correspondem ao confinamento retangular.

FIGURA V-3.2c - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0), calculadas para fios quânticos com as características iguais aos utilizados na figura V-3.2b, no modelo de duas sub-bandas, com duas sub-bandas ocupadas. As linhas contínuas correspondente ao confinamento retangular ($L=100nm$) e as linhas pontilhadas e tracejadas correspondem ao confinamento parabólico ($\hbar\Omega=1.7meV$).

grandes entre os resultados - as energias obtidas com o potencial retangular são menores do que as obtidas com o potencial parabólico, em virtude do potencial efetivo autoconsistente obtido com o confinamento retangular ser menos repulsivo do que no caso de confinamento parabólico.

As energias de plásmons intersub-bandas, entre a primeira e a segunda sub-bandas, são mostradas na figura V-3.2c, onde verificamos um comportamento oposto ao observado no gráfico V-3.2b, ou seja: as energias obtidas com o potencial retangular ($L=100\text{nm}$), representadas pelas linhas contínuas, são maiores do que as obtidas com o potencial parabólico ($\hbar\Omega=1.7\text{meV}$), representadas pelas linhas pontilhadas e tracejadas. Este comportamento é justificado, porque neste caso, o potencial efetivo autoconsistente, obtido com o confinamento retangular, é mais repulsivo do que no confinamento parabólico. A partir da figura V-3.2c, notamos também que a diferença entre os resultados obtidos com as aproximações RPA e STLS é maior no cálculo com o potencial de confinamento retangular do que com o potencial parabólico. Os nossos resultados revelaram ainda que, a sub-banda correspondente ao estado fundamental é praticamente independente do potencial de confinamento.

V-3.3. MODELO DE TRÊS SUB-BANDAS COM APENAS UMA OCUPADA

Apresentaremos a seguir, os resultados para as oscilações coletivas intra e intersub-bandas e para os potenciais efetivos intersub-bandas: $\Psi_{1010}(q_x a^*)$ e $\Psi_{2020}(q_x a^*)$, no modelo de três sub-bandas, onde somente a primeira sub-banda é ocupada. As

relações de dispersão para os modos simétricos, serão calculadas pelas equações desacopladas: (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4), pelos mesmos motivos, argumentados na seção IV-3.3. Para os modos antissimétricos será utilizada a equação exata (IV-3.3.2).

Na figura V-3.3a, apresentamos os resultados para as energias de plásmons, calculadas com as equações: (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4), com densidade $\rho=2.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Na figura V-3.3b, apresentamos as energias de plásmons intersub-bandas (1-0), calculadas com a equação (IV-3.3.2), com a mesma densidade utilizada na figura V-3.3a. Utilizamos, nas duas figuras, confinamento parabólico com uma separação de energia entre as sub-bandas típica: $\hbar\Omega=2\text{meV}$ - a maioria dos experimentos com fios quântico de GaAs é realizada com esta energia de confinamento. Notamos, através das figuras V-3.3a e V-3.3b, que as curvas calculadas com a aproximação STLS ficam sempre abaixo das curvas obtidas com a aproximação RPA. Isto porque, devido às correlações de curto alcance, o potencial STLS é menos repulsivo do que o potencial RPA. Devemos ressaltar que este comportamento também foi observado na seção IV-3.3, onde utilizamos potencial de confinamento retangular.

Na figura V-3.2c apresentamos, os potenciais efetivos intersub-bandas $\Psi_{1010}(q_x a^*)$ e $\Psi_{2020}(q_x a^*)$, representados, respectivamente, pelas linhas contínuas e pelas linhas descontinuas. Os parâmetros utilizados foram iguais aos utilizados nas figuras V-3.3a e V-3.3b. Notamos que, o potencial intersub-bandas $\Psi_{2020}(q_x a^*)$, é mais repulsivo do que o potencial intersub-bandas $\Psi_{1010}(q_x a^*)$. Acreditamos que isto acontece porque, o sistema (2-0) tem paridade par. Haverá, portanto, uma superposição maior das funções de onda de confinamento do que no sistema (1-0), no cálculo do potencial.

FIGURA V-3.3a - Curvas de dispersão de plásmons calculadas com confinamento parabólico com separação de energia entre os sub-níveis de $\hbar\Omega=2meV$ e com densidade $\rho=2.5 \times 10^5 cm^{-1}$, no modelo de três sub-bandas, onde apenas primeira é ocupada. As duas linhas superiores correspondem às relações de plásmons intersub-bandas (2-0) e as linhas inferiores correspondem às relações intra-sub-bandas (0-0). A área hachurada corresponde ao espectro de excitação de partícula única.

FIGURA V-3.3b - Excitações coletivas intersub-bandas (1-0), calculadas com confinamento parabólico com características iguais às utilizadas na figura V-3.3a, no modelo de três sub-bandas, com apenas uma sub-banda ocupada. A linha tracejada corresponde à aproximação RPA e a linha contínua à aproximação STLS. A área hachurada corresponde ao espectro de excitação intersub-bandas de partícula única.

FIGURA V-3.3c - Potencial efetivo intersub-bandas para fios quânticos parabólicos com as características iguais ao utilizado na figura V-3.3a. As linhas contínuas correspondem ao potencial intersub-bandas (1-0) e as linhas descontinuasao potencial intersub-bandas (2-0).

V-4. CONCLUSÕES

Notamos através dos resultados obtidos neste capítulo, que em sistemas eletrônicos quase unidimensionais, com potencial de confinamento parabólico, no modelo de várias sub-bandas, os efeitos devido à correção de campo local também são importantes e não devem ser desprezados. Observamos que a sub-banda correspondente ao estado fundamental é praticamente independente do potencial de confinamento. Isto ocorre porque, os elementos de matriz da interação de Coulomb, para os dois tipos de confinamento - (IV.2.6) e (V-2.4) - são praticamente equivalentes no estado fundamental. No confinamento parabólico, o potencial de interação entre os elétrons é mais repulsivo nas transições intra-sub-bandas e menos repulsivo nas transições intersub-bandas, quando comparado com o confinamento retangular. Este efeito, é refletido nas oscilações de plásmons e no fator de estrutura. Como no caso de confinamento retangular, notamos que quando consideramos o modelo de várias sub-bandas, os modos correspondentes às excitações intersub-bandas são observados e, que, as correções de campo local são mais pronunciadas no regime de densidades eletrônicas intermediárias e baixa. Observamos ainda que, à medida que diminuimos a diferença de energia entre as sub-bandas - o que equivale a aumentarmos a largura do poço quântico, no confinamento retangular, os efeitos devido as correlações de curto alcance vão se tornando menos expressivos.

CAPÍTULO VI

TEORIA STLS GENERALIZADA APLICADA AO GEQ1D LEVANDO EM CONSIDERAÇÃO O ACOPLAMENTO PLÁSMONS-FÔNONS

VI-1. INTRODUÇÃO

Os sistemas eletrônicos quase unidimensionais ou fios quânticos, são geralmente fabricados de microestruturas semicondutoras fracamente polares, constituídas de materias da série III-V. Nesses materiais, as vibrações óticas da rede são acopladas aos elétrons, em virtude do campo elétrico macroscópico de longo alcance, gerado pelas vibrações de átomos opostamente carregados. Desde que o coplamento entre os elétrons e os fônons óticos existe, temos então que considerar, nestes sistemas, as interações elétron-elétron e elétron-fônon. Por conseguinte, ambos os sistemas serão modificados: eletrônico e de fônons [48-50]. O acoplamento polar entre as excitações coletivas do GEQ1D e os fônons óticos pode ser muito forte quando as frequências de ambos - plásmos e fônons óticos - são comparáveis e, neste caso, um gás de polarons é formado. Deste modo, os elétrons do GEQ1D, de uma microestrutura de um semicondutor polar, podem ser espalhados devido à interação: elétron-elétron e elétron-fônon.

No caso 3D (ou no bulk) a situação física é a seguinte: a frequência de plasma dos elétrons de condução é constante em uma grande extensão do vetor de onda $\vec{q}$ e é muito maior do que a frequência (ω_{LO}) dos fônons longitudinais óticos (LO). Os fônons LO de longo comprimento de onda são os que se acoplam com os elétrons. Neste caso, o gás de elétrons pode responder com frequências maiores do que as dos fônons e consequentemente blin-

dará os fônons LO e a interação elétron-fônon. No entanto, os fônons não poderão seguir as oscilações de plasma do gás de elétrons e por conseguinte não irão contribuir para a blindagem da interação elétron-elétron, o que leva a blindagem estática a se constituir em uma boa aproximação, para estudar a interação elétron-fônon no sistema 3D.

No caso do gás de elétrons bidimensional (GE2D) e do GEQ1D a situação é completamente diferente. As frequências de plasma (ω) do GE2D e do GEQ1D são dadas (na aproximação de longo comprimento de onda), respectivamente por: $\omega^{2D} = (2\pi\rho e q^2 / m\epsilon_\infty)^{1/2}$ e $\omega^{1D} = [2\pi\rho e^2 q^2 \ln(qa) / m\epsilon_\infty]^{1/2}$ [55], onde ρ é a densidade eletrônica e ϵ_∞ é a constante dielétrica de altas frequências do semiconductor. Por isso, em uma grande extensão do vetor de onda $\vec{q}$ a frequência de plasma dos sistemas GE2D e GEQ1D é muito menor do que a frequência dos fônons de longo comprimento de onda. Isto também é verdadeiro para um gás de elétrons quase bidimensional. Portanto no GEQ1D, na região em que $q < q^*$ (onde q^* é o ponto de intersecção de ω com ω_{LO}) o gás de elétrons não poderá oscilar tão rapidamente quanto os fônons e por conseguinte não poderá blindar os fônons gerados pelo campo de Coulomb de longo alcance. Mas os fônons poderão agora seguir as oscilações do gás de elétrons e consequentemente irão contribuir para a blindagem das oscilações de plasma. Apenas na região em que $q \gg q^*$, tem-se uma situação na qual a blindagem estática é uma boa aproximação para o estudo das interações elétron-fônon.

Nos capítulos IV e V, não levamos em consideração o fato de os elétrons também poderem ser espalhados pelos fônons. Neste capítulo, incluiremos em nossas investigações sobre as propriedades do GEQ1D, a interação dos elétrons com os fônons LO em 3D. Com

o intuito de comparar os nossos resultados com os da referência [27], vamos supor que os elétrons estão confinados no plano x-y: em $z=0$ e, na direção y, por um poço de potencial quadrado ($0 < y < L$), de barreira infinita.

VI.2- FORMULAÇÃO TEÓRICA

O procedimento utilizado para determinar as propriedades do gás de polarons quase unidimensional (GEQ1D) acoplado aos fônons óticos), na aproximação RPA, tem sido através da solução da equação de Dyson para o potencial de interação dinamicamente blindado [27,40,53]. A partir deste potencial de interação, determina-se então as relações de dispersão acopladas.

O potencial de interação total, sem blindagem, de acordo com este modelo, para um fio quântico, é dado por:

$$V_{ij\ell m}(q_x, \omega) = V_{ij\ell m}^{ee}(q_x) + V_{ij\ell m}^{eF}(q_x, \omega), \quad (\text{VI-2.1})$$

onde $V_{ij\ell m}^{ee}(q_x)$ e $V_{ij\ell m}^{eF}(q_x, \omega)$ representam, respectivamente, a interação elétron-elétron e a interação elétron-fônon, sem blindagem. A interpretação deste potencial é a seguinte: um elétron é espalhado de uma sub-banda j para uma sub-banda i enquanto um outro elétron é espalhado de uma sub-banda m para uma sub-banda ℓ . A expressão para determinar o potencial Coulombiano $V_{ij\ell m}^{ee}(q_x)$ é obtida simplesmente pela substituição de ϵ por ϵ_∞ , na equação (IV.2.6), ou seja:

$$\infty \quad F \quad (k, q)$$

$$V_{ij\ell m}^{ee}(q_x) = \frac{2e^2}{\epsilon_\infty} \int_0^\infty dk \frac{ij\ell m \quad x}{(k^2 + q_x^2)^{1/2}}, \quad (\text{VI-2.2})$$

onde $F_{ij\ell m}(k, q_x)$ é o fator de forma, cuja expressão é dada pela equação (IV-2.7).

Para simplificar os nossos cálculos, no potencial de interação elétron-fônon $V_{ij\ell m}^{eF}(q_x, \omega)$, vamos considerar que apenas os fônons longitudinais óticos 3D, interagem com os elétrons do GEQ1D. Este potencial é dado por:

$$V_{ij\ell m}^{eF}(q_x, \omega) = \frac{2\omega_{LO}/\hbar}{\omega^2 - \omega_{LO}^2} F_{ij\ell m}^{LO}(q_x), \quad (\text{VI-2.3})$$

onde ω_{LO} é a frequência dos fônons LO do semiconductor que contém o GEQ1D. O fator de forma $F_{ij\ell m}^{LO}(q_x)$ é dado por

$$F_{ij\ell m}^{LO}(q_x) = 2\alpha r_p (\hbar\omega_{LO})^2 \int_0^\infty dk \frac{F_{ij\ell m}(k, q_x)}{(k^2 + q_x^2)^{1/2}}, \quad (\text{VI-2.4})$$

onde α é a constante de acoplamento adimensional de Fröhlich do polaron 3D e r_p é o raio correspondente.

O potencial de interação total, na aproximação RPA, pode ser escrito na forma

$$V_{ij\ell m}(q_x, \omega) = \frac{2e^2}{\epsilon(\omega)} \int_0^\infty dk \frac{F_{ij\ell m}(k, q_x)}{(k^2 + q_x^2)^{1/2}}, \quad (\text{VI-2.5})$$

onde $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty}(\omega_{LO}^2 - \omega^2)/(\omega_{TO}^2 - \omega^2)$ é a função dielétrica da rede 3D e ω_{TO} é a frequência dos fônons transversais óticos. Note que a equação (VI-2.5) é obtida a partir da equação (VI-2.2) fazendo simplesmente a substituição de ε_{∞} por $\varepsilon(\omega)$.

Na aproximação STLS generalizada, o potencial efetivo autoconsistente, $\Psi_{ij\ell m}(q_x, \omega)$, será então dado por:

$$\Psi_{ij\ell m}(q_x, \omega) = \left(1 - G_{ij\ell m}(q_x, \omega)\right) V_{ij\ell m}(q_x, \omega), \quad (\text{VI-2.6})$$

onde

$$G_{ij\ell m}(q_x, \omega) = -\frac{1}{\pi \rho q_x V_{ij\ell m}(q_x, \omega)} \times \int_0^{\infty} dq'_x q'_x V_{ij\ell m}(q'_x, \omega) \left[S_{ij\ell m}(q_x - q'_x) - 1\right] \quad (\text{VI-2.7})$$

é a correção de campo local.

O fator de estrutura estático,

$$S_{ij\ell m}(q_x) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \chi_{ij\ell m}(q_x, \omega) \quad (\text{VI-2.8})$$

e a susceptibilidade generalizada,

$$\chi_{ij\ell m}(q_x, \omega) = \frac{\chi_{\ell m}(q_x, \omega)}{\delta_{il} \delta_{jm} - \Psi_{ij\ell m}(q_x, \omega) \chi_{\ell m}(q_x, \omega)}, \quad (\text{VI-2.9})$$

que é agora função de um potencial efetivo dinâmico: $\Psi_{ij\ell m}(q_x, \omega)$,

são grandezas que permanecem com os mesmos significados às suas correspondentes dos capítulos IV e V. A função de correlação dos pares, $g(x)$, é obtida através da equação (IV-2.14).

As propriedades do gás de polarons são então determinadas a partir da solução autoconsistente das equações (VI-2.7), (VI-2.8) e (VI-2.9).

VI-3. RESULTADOS

O propósito deste capítulo foi estudar as propriedades do GEQ1D, levando em consideração a interação dos elétrons com os fônons LO em 3D. Com o objetivo de avaliar os nossos cálculos, procedemos como nos capítulos anteriores, ou seja: utilizamos a aproximação RPA onde as correções de campo local são negligenciadas. Os nossos resultados para as excitações de plásmons obtidos com a aproximação RPA ($G_{ij\ell m}(q_x, \omega) = 0$) foram comparados com os obtidos por L. Wendler et al. [27] e demonstraram ser equivalentes quando usamos fios quânticos com as mesmas características, isto é: retangulares de largura $L=50\text{nm}$ e com densidade $\rho=0.5 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, no modelo de três sub-bandas.

Nas figuras VI-3.1 e VI-3.2 apresentamos todas as relações de dispersão dos modos acoplados, obtidas com a aproximação STLS generalizada, para o caso do modelo de três sub-bandas, onde somente a sub-banda mais baixa está ocupada. As áreas hachuradas no plano ω - q_x são regiões de partícula única. Nessas regiões, $\text{Im}\chi_{\ell m}(q_x, \omega)$ é diferente de zero e as excitações são amortecidas (Landau damping). Nossas investigações sobre os modos aco-

plados foram realizadas apenas fora dessas regiões. As relações de dispersão do acoplamento plásmons-fônons dos modos simétricos, (0-0) e (2-0) - veja as equações (IV-3.3.3) e (IV-3.3.4) -, bem como a relação de dispersão dos fônons LO são mostradas na figura VI-3.1. Observamos que a correção de campo local provoca um deslocamento para baixo na curva de dispersão das frequências de plásmons e um deslocamento para cima na curva de dispersão dos fônons LO. Na figura VI-3.2 apresentamos a relação de dispersão intersub-banda antissimétrica (1-0) - veja a equação (IV-3.3.2) - do acoplamento plásmons-fônons. Podemos notar que o comportamento é qualitativamente igual ao da figura VI-3.1, isto é, as correlações de curto alcance provocam um deslocamento para cima na curva de dispersão dos fônons LO e um decréscimo na depolarização. Isto ocorre devido aos efeitos das correlações de curto alcance, consideradas no modelo STLS. O potencial torna-se então menos repulsivo e por conseguinte a curva de dispersão de plásmon sofre um deslocamento para baixo, tornando a depolarização na aproximação STLS menor do que na aproximação RPA.

FIGURA VI-3.1 - Relação de dispersão dos modos simétricos, (0-0) e (2-0), do acoplamento plásmons-fônons no modelo de três sub-bandas com apenas uma sub-banda ocupada. As linhas tracejadas correspondem à aproximação RPA e as linhas pontilhadas à aproximação STLS. As áreas hachuradas correspondem ao espectro de partícula única intra e intersub-bandas. Os parâmetros utilizados no cálculo foram: $L=50nm$, $\rho=0.05 \times 10^7 cm^{-1}$ e $\epsilon_\infty=10.9$.

FIGURA VI-3.2 - Relação de dispersão dos modos antissimétricos (1-0), calculados com os mesmos parâmetros utilizados na figura VI-3.1, do acoplamento plásmons-fônons no modelo de três sub-bandas com apenas uma sub-banda ocupada. As linhas tracejadas correspondem à aproximação RPA e as linhas pontilhadas à aproximação STLS generalizada. A área hachurada corresponde ao espectro de partícula única intersub-banda.

VI-4. CONCLUSÕES

Os resultados apresentados neste capítulo, obtidos com a aproximação STLS generalizada, para as relações de dispersão do acoplamento plásmons-fônons em sistemas quase unidimensionais, reforça a nossa convicção de que, mesmo para densidades relativamente altas, não podemos desprezar os efeitos das correlações de curto alcance no estudo das propriedades eletrônicas de fios quânticos de GaAs/AlGaAs. Nos cálculos realizados com densidades mais baixas e/ou para fios quânticos com espessuras menores, observamos o que já havíamos constatado nos capítulos IV e V, ou seja: a aproximação RPA é falha porque fornece uma função de correlação dos pares negativa (não tendo, portanto, significado físico) o que não acontece com a aproximação STLS generalizada. Devemos ressaltar ainda que, os nossos cálculos demonstraram que a interação dos elétrons com os fônons LO diminui as energias das excitações coletivas, deslocando as curvas de dispersão do acoplamento plásmons-fônons para energia menores (para $G_{ij\ell m}(q_x, \omega)=0$, nossos resultados reproduzem os resultados recentemente obtidos por L. Wendler al. [27]). Este comportamento é devido aos efeitos de blindagens originários das correlações de curto alcance, considerados no modelo STLS. Por outro lado, as curvas de dispersão dos fônons LO sofrem um deslocamento para cima. Estes resultados estão coerentes com os resultados de L. Wendler al. os quais utilizaram a aproximação das fases aleatórias (RPA). Nossos resultados, para as relações de dispersão dos fônons LO, reproduzem os resultados RPA para $G_{ij\ell m}(q_x, \omega)=0$ e, para $G_{ij\ell m}(q_x, \omega)\neq 0$, estão deslocados ligeiramente para frequências maiores.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES FINAIS

Investigamos neste trabalho os efeitos das correlações de curto alcance nas propriedades de um gás de elétrons homogêneo, no modelo sugerido por Singwi et al.[1,2].

Inicialmente estudamos o gás de elétrons tridimensional originário de impurezas doadoras em silício e germânio. O fator de estrutura $S(\vec{q})$ foi calculado juntamente com a correção de campo local $G(\vec{q})$ de forma autoconsistente. A partir da correção de campo local, determinamos a função dielétrica estática na aproximação STLS e então fizemos a blindagem do potencial de Coulomb - elétron-ion de impureza -, para determinarmos o potencial efetivo e, posteriormente, a densidade crítica N_c em que a transição semicondutor-metal ocorre, através da análise da energia de ligação do elétron ao ion, determinada por uma aproximação variacional. Comparamos os resultados obtidos para a densidade crítica com outros resultados teóricos - em particular com a aproximação RPA, que é amplamente utilizada no estudo de muitos corpos -, e com medidas experimentais da transição de Mott em germânio e silício. Verificamos que nossos resultados, obtidos com o potencial STLS, demonstram uma boa concordância com os resultados experimentais e uma sensível melhoria em relação aos outros resultados teóricos, em particular com os resultados por nós obtidos, com a aproximação RPA.

Do gás de elétrons tridimensional, passamos à investigação de sistemas eletrônicos quase unidimensionais. Tive-

mos primeiramente que generalizar a teoria STLS para incluirmos o modelo de multissub-bandas nesses sistemas - duas e três sub-bandas. Após a generalização da teoria STLS, utilizamos o modelo em fios quânticos retangulares de barreira infinita. Calculamos numericamente; as excitações coletivas intra e intersub-bandas, o fator de estrutura, a correção de campo local, o potencial efetivo autoconsistente e a função de correlação dos pares, para várias larguras: 30nm, 50nm e 100nm. Os resultados demonstraram que para todas larguras e densidades calculadas, as correções de campo local introduzem diferenças significativas, em relação à aproximação RPA - que para densidades mais baixas fornece, inclusive, valores negativos para a função de correlação dos pares. Notamos, entretanto, que à medida que aumentamos a largura do fio quântico, os efeitos devido à correção de campo local vão se tornando menos importantes. Isto ocorre porque, aumentando a largura L do fio quântico e mantendo a densidade linear ρ , constante, haverá uma menor superposição das funções de onda eletrônicas e, por conseguinte, os efeitos originários das correlações de curto alcance diminuem.

O segundo sistema unidimensional que investigamos foi o gás de elétrons em um fio quântico parabólico. Nossos resultados mostraram que em sistemas quase unidimensionais com confinamento parabólico, no modelo de várias sub-bandas, os efeitos oriundos da correção de campo local também são relevantes e não devem ser ignorados. Os resultados relativos ao estado fundamental são praticamente iguais aos resultados obtidos com o potencial retangular de barreira infinita, calculados no capítulo IV. Isto ocorre porque, os elementos de matriz da interação de Coulomb, no estado fundamental, são praticamente equivalentes para os dois tipos de

confinamento (IV-2.6) e (V-2.4). Para os estados excitados, o potencial de interação entre os elétrons é menos repulsivo nas transições intersub-bandas e mais repulsivo nas transições intra-sub-bandas, quando confrontados com os resultados obtidos com o potencial retangular. Este comportamento, é refletido no fator de estrutura e nas relações de dispersão das excitações coletivas. Neste caso, também observamos que, a medida que diminuimos a diferença de energia entre as sub-bandas, o que equivale a aumentarmos a largura do poço quântico, no confinamento retangular, os efeitos originários da correção de campo local tornam-se menos expressivos.

O terceiro sistema unidimensional que estudamos foi o gás de polarons em um fio quântico com confinamento retangular, de barreira infinita. Os resultados obtidos para as curvas de dispersão do acoplamento plásmons-fônons, com $G_{ij\ell m}(q_x)=0$ - o que é equivalente ao cálculo com a aproximação RPA, foram comparados com os resultados de Lutz Wendler et al. [27] e demonstraram ser iguais quando calculados para os mesmos sistemas e com os mesmos parâmetros. Como no caso do gás de elétrons quase unidimensional - capítulos IV e V -, observamos que os efeitos de blindagens na aproximação STLS generalizada são mais significativos que na aproximação RPA - isto pode ser observado nas relações de dispersão dos modos acoplados plásmons-fônons. Para densidades mais baixas (e/ou poços mais estreitos) notamos um comportamento similar ao observado nos capítulos IV e V, ou seja: verificamos que um decréscimo na largura do poço quântico (e/ou uma diminuição da densidade eletrônica) aumenta os efeitos do campo local.

As regiões de aplicabilidade do modelo autoconsistente foram de $\rho \geq 1.40 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ para o caso do gás de elétrons

anisotrópico tridimensional, investigado no capítulo III. Nos sistemas unidimensionais, os quais utilizamos a teoria STLS generalizada, as regiões variam de $\rho \geq 3.27 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ para fios quânticos de largura $L=30\text{nm}$ e de $\rho \geq 1.64 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ para fios quânticos de largura $L=100\text{nm}$. Para valores de ρ inferiores a esses limites, os sistemas de equações autoconsistentes já não convergem para uma única solução. A explicação para o fato do intervalo de ρ ser bastante limitado no caso de fios quânticos de largura $L=30\text{nm}$, a nosso ver, é porque neste caso, a aproximação na qual consideramos apenas a sub-banda mais baixa ocupada, na direção de confinamento em z , não é boa - esta aproximação foi utilizada devido as características típicas dos fios quânticos de GaAs/AlGaAs: $5 \leq z \leq 20\text{nm}$ e $40 \leq y \leq 100\text{nm}$. Se z é aproximadamente igual a y ($z \approx y$) não devemos desprezar as transições na direção z .

Nós entendemos que este trabalho, além de ter contribuído no sentido de aprimorar alguns cálculos teóricos já elucidados pela literatura, também contribuiu significativamente ao generalizar um modelo para investigar os sistemas quase unidimensionais, o gás de elétrons e o gás de polarons quase unidimensionais.

Finalmente, gostaríamos de chamar a atenção para alguns, dos vários problemas nessa linha, nos quais poderíamos aplicar a teoria STLS generalizada. Podemos determinar por exemplo, a taxa de espalhamento, a massa efetiva, o fator de renormalização de quase partículas e a renormalização da banda proibida, devido aos efeitos de troca e correlação, no GEQ1D. Esses cálculos podem ser realizados considerando uma correção de campo local na função dielétrica e na auto-energia, dentro do modelo GWF [53,54]. Podemos determinar ainda a energia de correlação e a energia do estado fundamental do GEQ1D, dos sistemas estudados, bem como determinar

as suas propriedades considerando outros tipos de confinamento. Alguns destes problemas já estão em andamento e em breve teremos resultados para serem anunciados.

REFERÊNCIAS

1. K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land e A. Sjölander, Phys. Rev. 176, 589 (1968).
2. K. S. Singwi, A. Sjölander, M. P. Tosi e R. H. Land, Phys. Rev B1, 1044 (1970).
3. P. Vashishta, K. S. Singwi, Phys. Rev. B6, 875 (1972).
4. K. F. Berggren, Phys. Rev. A1, 1783 (1970).
5. O. Hipólito e R. Lobo, Phys. Rev. B14, 3892 (1976).
6. R. Bansal e Ailawadi, Phys. Rev. A16, 1228 (1977).
7. N. Studart e O. Hipólito, Phys. Rev. A19, 1970 (1979); A12, 2860 (1980).
8. V. B. Campos e O. Hipólito, Phys. Rev. B40, 9306 (1989).
9. M. Jonson, J. Phys. C9, 3055 (1976).
10. V. B. Campos, O. Hipólito e R. Lobo, Phys. Status Solidi (b) 81, 657 (1977).
11. V. B. Campos, M. H. Degani e O. Hipólito, Solid State Commun. 79, 473 (1991).
12. W. I. Friesen e B. Bergersen, J. Phys. C13, 6627 (1980).
13. H. V. da silveira, M. H. Degani e K. S. Singwi, Phys. Rev. B46, 2995 (1992).
14. A. Newton Borges, V. B. Campos e O. Hipólito, Phys. Rev. B (a ser publicado).
15. R. L. Green, C. Aldrich e K. K. Bajaj, Phys. Rev. B15, 2217 (1977).
16. J. B. Krieger e M. Nightingale, B4, 1266 (1971).
17. C. Aldrich, Phys. Rev. B16, 2723 (1977).
18. Y. P. Varshni e S. M. Khanna, Phys. Rev. B43, 9279, (1991).
19. F. Marttino, G. Limdell e V. F. Berggren, Phys. Rev. B8, 6030 (1973).
20. A. Brezini e N. Zekri, Phys. Stat. Sol. (b) 167, K33 (1991).
21. P. P. Edwards e M. J. Sienko, Phys. Rev. B17, 2575 (1978).
22. M. L. Kozhukh, N. S. Lipkina e I. S. Shlimak, Sov. Phys. Semicond. 19(2), 206 (1985).
23. V. P. Dobrego, O. P. Ermolaev e O. M. Khemeda, Sov. Phys. Semicond. 24(3), 348 (1990).
24. T. G. Castner e N. K. Lee, Phys. Rev. Lett. 26, 1627 (1975).

25. M. N. Alexander e Donald F. Holcomb, *Rev. Mod. Phys.* 40, 815 (1968).
26. A. Newton Borges, M. H. Degani e O. Hipólito, *Superlatt. Micostruct.* 13, 1993.
27. L. Wendler, R. Haupt e R. Pechstedt, *Phys. Rev.* B43, 14699 (1991); *Surf. Sci.* 263, 363 (1992).
28. D. Pines, Elementary excitations in solids . W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964. Cap.3.
29. D. Pines e P. Nozières, The theory of quantum liquids. W. A. Benjamin, Inc., New York, 1989. Cap.2, v.I.
30. A. L. Fetter e J. D. Walecka, Quantum Theory of Many Particles Systems. McGraw Hill, New York, 1971. Cap.5. 31.
31. G. Mahan, Many-Particle Physics. Plenum, New York, 1981. Cap.5.
32. W. Marshall E. S. W. Lovesey, Theory of Thermal Neutron Scattering. Oxford University Press, London, 1971. Cap.1.
33. W. Kohn e J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* 97, 1721 (1955); 98, 915 (1955).
34. C. Kittel A. H. Mitchell, *Phys. Rev.* 96, 1488 (1954); M. Lampert, *ibid.* 97, 352 (1955); W. Kleiner, *ibid.* 97, 1722 (1955).
35. H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* 19, L735 (1980).
36. P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan e W. W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 41, 635 (1982).
37. M. H. Degani e O. Hipólito, *Surf. Sci.* 229, 279 (1990).
38. A. Ferreira da Silva, *Phys. Rev.* B41, 1684 (1990).
39. A. Gold e A. Ghazali, *Phys. Rev.* B41, 7626 (1990); B41, 8318 (1991).
40. R. Haupt, L. Wendler e R. Pechstedt, *Phys. Rev.* B44, 13635 (1991).
41. Q. Li e S. Das Sarma, *Phys. Rev.* B40, 5860 (1989); B43, 11768 (1991).
42. B. Yu-K. Hu e S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* 68, 1750 (1992).
43. Z. Wu e P. P. Ruden, *J. Appl. Phys.* 71(3), 1318 (1992).
44. T. Demel, D. Heitmann, P. Grambow e K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* 66, 2657 (1991).
45. R. Cingolani et al., *Phys. Rev. Lett.* 67, 892 (1991).
46. W. Hansen et al., *Phys. Rev. Lett.* 58, 2586 (1987).

47. S. E. Laux e F. Stern, Appl. Phys. Lett. 49, 91 (1986).
48. M. H. Degani, U. Freitas, O. Hipólito e N. Studart, Phys. Rev. B37, 137 (1988).
49. M. H. Degani e O. Hipólito, Solid. State Comm. 65, 1185 (1988).
50. V. B. Campos M. H. Degani e O. Hipólito, Solid. State Comm. 79, 473 (1991).
51. F. M. Peeters e O. Hipólito, Braz. J. Phys. 22, 183 (1992).
52. L. Wendler e R. Pechstedt, Phys. Stat. Sol. (b) 138, 197 (1986); (b) 141, 129 (1987).
53. L. Hedin e S. Lundqvist, Solid. State Phys. 23, 135 (1969).
54. G. Mahan e B. E. Sernelius, Phys. Rev. Lett. 62, 2718, (1988).
55. W. L. Schaich e A. H. MacDonald, Solid. State Comm. 83, 779 (1992).