UNIVERSIDADE DE SAO PAULO
INSTITUTO DE FISICA E QUIMICA DE SAO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FISICA E CIENCIA DOS MATERIAIS

Excitons ligados a impurezas
doadoras em semicondutores

Jean-Jacques G.S.De Groote

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para
obtenção do título de
Mestre em Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. José Eduardo M. Hornos

São Carlos - São Paulo
1990

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
Jean Jacques G.S.De Groote APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 29 DE março DE 19890.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. José E. Martinho Hornos Orientador

Dr. Oscar Hipólito

Dr. Hêlio Teixeira Coelho

Indice

Resumo	1
Summary	2
I. Introdução	3
II. Hamiltoniana do sistema de três corpos e coordenadas Hiperesfericas	5
A) Hamiltoniana do sistema excitonico ligado a impureza	5
B) Coordenadas Hiperesfericas	6
C) Operador angular	7
D) Tratamento adiabatico	10
III. Solução angular	12
A) Expansão em harmonicos hiperesfericos e tratamento das singularidades	12
B) Expansão em series de potencias	14
C) Limite assintotico	17
D) Resultados praticos e limitações da solução angular	18
IV. Solução da equação radial e obtenção da energia do sistema	22
A) Função de onda no limite de $R \rightarrow 0$	22
B) Função de onda no limite de $R \rightarrow \infty$	24
V. Aplicações	26
A) Energia de ligação e curvas de potencial do estado fundamental	27
B) Funções de onda no continuo	29
C) Energia de ligação em semicondutores	32
D) Massa critica e deslocalização	35
E) Confinamento	37
VI. Conclusão	38
Apendices A	39
Apendice B	42
Bibliografia	44

Resumo

O estudo de excitons livres é realizado de modo adequado por uma simples aproximação hidrogenoide, mas, quando estão ligados a imperfeições torna-se necessário uma aproximação matemática mais sofisticada. Neste trabalho, o sistema de três corpos exciton-impureza é analisado pelo método das coordenadas hiperesfericas na aproximação adiabática, introduzindo este método em problemas de física do estado sólido. Entre os resultados obtidos estão valores precisos de energia de ligação para estados fundamentais e a predição de ressonâncias.

SUMMARY

The study of free excitons can be adequately performed through a simple hydrogenoid approximation, but, when they are linked to impurities a more sophisticated mathematical approach is required. In this work, the exciton-impurity three body system is analyzed with the method of the hyperspheric coordinates in the adiabatic approach, introducing this method to solid state physical problems. Included in obtained results are precise values for the bonding energy for the ground state and the prediction of resonances.

Excitons ligados a imperfeições em semicondutores tem sido objeto de extensivas investigações tanto do ponto de vista teórico como experimental⁽¹⁻⁸⁾. O passo decisivo para o entendimento de excitons ligados foi dado por Hopfield⁽¹⁾ em 1964, onde esses sistemas foram analisados a partir do modelo da massa efetiva onde os excitons são vistos como um par de partículas de cargas opostas, um elétron e um buraco, com massas efetivas m_e e m_b interagindo via potencial de Coulomb. Os complexos efeitos da física de muitos corpos, que caracterizam os materiais semicondutores são incorporados nesse modelo através da constante dielétrica de baixa frequência ϵ , e das massas efetivas obtidas experimentalmente⁽⁸⁾. A correspondência deste modelo simples com dados experimentais é uma indicação de que a aproximação envolve os aspectos físicos fundamentais. Desta maneira o problema de estado sólido se reduz a solução do problema não relativístico de três corpos. É importante notar que o exciton forma um estado ligado com a impureza doadora apenas quando a energia de ligação é maior que a energia da impureza neutra, caso contrário o sistema decai formando uma impureza neutra e um buraco livre. Hopfield estimou as energias de ligação por extrapolação de energias de ligação moleculares. Cálculos mais acurados foram feitos por Rodriguez et al⁽³⁾ e Suffczynski et al^(6,7) utilizando métodos variacionais.

O método adotado aqui para a obtenção de funções de onda e energia de ligação consiste na integração da equação de Schrödinger usando o tratamento hiperesférico adiabático, que foi introduzido em física atômica por Macek⁽⁹⁾ na aproximação em que desacopla-se as equações radiais negligenciando os termos de acoplamento não diagonais. A razão para a utilização dessas técnicas sofisticadas usualmente reservadas para o cálculo de propriedades no contínuo é devido aos reduzidos valores das energias de ligação desses sistemas. A proximidade do estado ligado da energia de ionização dificulta os cálculos variacionais frequentemente empregados, exigindo resultados de grande precisão.

O método das coordenadas hiperesféricas tem sido usado por mais de 3 décadas em física nuclear^(10,11) e atômica. Entretanto nas aplicações em física atômica e molecular⁽¹²⁻¹⁷⁾ ela estava obstruída pela inexistência de métodos matemáticos que gerassem procedimentos computacionais estáveis e acurados. Essa situação é especialmente grave para grandes valores de R . O tratamento teórico neste trabalho consiste na generalização do método desenvolvido em 1985 por Hornos et al⁽¹⁷⁾ para o átomo de hélio, onde as dificuldades citadas foram resolvidas expandindo a função de onda angular em séries de potência numa variável adequada, que gera equações diferenciais acopladas com coeficientes polinomiais, conveni-

entes para o tratamento computacional.

A organização deste trabalho é descrita a seguir. Na seção II.A o sistema é equacionado conforme o modelo proposto. As coordenadas hiperesféricas são introduzidas na seção II.B, e o hamiltoniano hiperesférico na seção II.C. A aproximação adiabática e a separação da função de onda em radial e angular são definidas na seção II.D. Nesta seção define-se a equação angular, a partir da qual obtém-se a curva de potencial, seus auto valores, que contem as informações das interações. O capítulo III é reservado a resolução da equação angular, que depende parametricamente da coordenada radial. Na seção III.A a função de onda angular é expandida em termos de solução exata para o limite de $R=0$, os hiperesféricos harmônicos, e transforma-se esta função de modo a eliminar singularidades, tendo em vista resultados computacionais. Com este mesmo objetivo, na seção III.B transforma-se a equação angular de modo a obter coeficientes polinomiais e faz-se uma expansão da função de onda em séries de potências. Na seção III.C obtém-se a solução da equação angular no limite de ionização. Esta solução, como será demonstrado, é a solução hidrogenóide, e será acrescentada à solução da curva de potencial de modo a evitar instabilidades para grandes valores da coordenada radial. Na seção III.D serão apresentados os resultados computacionais dos cálculos realizados.

No capítulo IV resolve-se a equação radial na aproximação adiabática extrema. As aplicações deste método são apresentadas no capítulo V. Na seção V.A são obtidos resultados gerais. A aplicação para casos de excítons ligados a impurezas em semicondutores e a comparação com resultados variacionais é feito na seção V.B. Com relação a funções de onda no contínuo, obteve-se dez ressonâncias apresentadas na seção V.C. O estudo das soluções na região da massa crítica e do comportamento do sistema excitônico confinado são tratados respectivamente nas seções V.D e V.E.

II Hamiltoniana do Sistema de Três Corpos e Coordenadas Hiperesféricas

A) Hamiltoniana do Sistema Excitonico Ligado a Impureza

No modelo Coulombiano de três corpos proposto, atribui-se ao eletrón uma massa m_1 e carga $-e$, ao buraco a massa m_2 e carga e , enquanto que a impureza doadora de carga Ze , onde Z é um inteiro positivo, passa a ser considerada de massa infinita tornando-se o centro de massa do sistema. Este trabalho consiste em resolver a equação de Schrödinger não relativística deste problema de três corpos de modo a obter as energias e funções de onda correspondentes. Sendo $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ os vetores posição das partículas negativa e positiva respectivamente, com relação ao centro de massa, E a energia do sistema associada a função de onda Ψ_0 , e ϵ a constante dielétrica do material semiconductor, tem-se então,

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m_2} - \frac{e^2 Z}{\epsilon |\vec{r}_1|} + \frac{e^2 Z}{\epsilon |\vec{r}_2|} - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - E \right] \Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (1)$$

onde,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2}, \quad (2)$$

é o laplaciano em três dimensões e L^2 o operador de momento angular. Os dois primeiros termos da eq.(1) são relativos a energia cinética e os três seguintes representam as interações eletrón-impureza, buraco-impureza e eletrón-buraco nesta ordem. A função de onda possui a normalização,

$$\int |\Psi_0|^2 d^3 r_1 d^3 r_2 = 1 \quad (3)$$

onde, $d^3 r = r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi$.

B)

Coordenadas Hiperesféricas

As coordenadas hiperesféricas R e α são definidas de forma a tratar as variáveis independentes $|\vec{r}_1|$ e $|\vec{r}_2|$ de modo coletivo através das relações,

$$R^2 = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2, \quad \tan(\alpha) = \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^{1/2} r_1 / r_2, \quad \begin{matrix} 0 \leq R \leq \infty \\ 0 \leq \alpha \leq \pi/2 \end{matrix} \quad (4)$$

onde a participação das massas foi escolhida de tal forma que na nova equação de Schrödinger elas estejam localizadas apenas nas novas expressões das interações, como será observado na próxima seção.

A mudança de $(r_1, r_2, \Omega_1, \Omega_2)$ para $(R, \alpha, \Omega_1, \Omega_2)$, onde Ω representa os ângulos esféricos ϕ e θ , leva um conjunto de duas coordenadas radiais e quatro angulares para apenas uma radial e cinco angulares compactas. A transformação inversa é obtida facilmente observando o esquema abaixo, notando que a ionização do sistema ocorre com $R \rightarrow \infty$ e $\alpha = 0$ ou $\alpha = \pi/2$.

$$\begin{aligned} r_1 &= (1/m_1)^{1/2} R \sin(\alpha), \\ r_2 &= (1/m_2)^{1/2} R \cos(\alpha) \end{aligned} \quad (5)$$

Figura 1: Correlação entre as coordenadas radiais e as hiperesféricas.

C)

Operador Angular

Reescreve-se a eq.(1) passando a utilizar as novas coordenadas R e α . Com as unidades adimensionais $\hbar=m_1=e=e=1$ e $m=m_2/m_1$, a nova equação do sistema é dada abaixo,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{4R^2} + 2E + \frac{U(R, \alpha, \Omega_1, \Omega_2)}{R^2} \right] \Psi(R, \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = 0, \quad (6)$$

onde o operador $U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2)$ é definido de modo a englobar toda dependência angular do novo Hamiltoniano, notando que não é totalmente separável dos operadores radiais por conter uma dependência linear de R , como pode-se observar em sua expressão,

$$U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{L_1^2}{\sin^2 \alpha} - \frac{L_2^2}{\cos^2 \alpha} - 2R \left(\frac{Zm}{\cos \alpha} - \frac{Z}{\sin \alpha} + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} \left(\sin^2 \alpha + \frac{\cos^2 \alpha}{m} - \frac{\sin 2\alpha \cos \theta_{12}}{(m)^{1/2}} \right) \right) \right] \quad (7)$$

com θ_{12} sendo ângulo entre os vetores posição $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$. A função de onda hipersférica relaciona-se com a anterior na forma,

$$\Psi = \left[\frac{R^{5/2} \sin \alpha \cos \alpha}{(m_1 m_2)^{3/4}} \right] \Psi_0, \quad (8)$$

onde o coeficiente é o jacobiano da transformação de coordenadas, levando à normalização,

$$\int |\Psi|^2 d\alpha dR d\Omega_1 d\Omega_2 = 1 \quad (9)$$

O operador U pode ser representado de outro modo chamando de V os termos do novo potencial e Λ^2 os termos puramente angulares da eq.(7), obtendo a expressão,

$$U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \Lambda^2(\alpha, \Omega_1, \Omega_2) - 2RV(\alpha, \Theta_{1,2}) \quad (10)$$

O comportamento do potencial hiperesferico $V(\alpha, \Theta_{1,2})$ pode ser observado na figura 2, notando que o polo atrativo da interação eletrôn-buraco passa a depender de m , ou seja, da razão das massas efetivas do eletrôn e do buraco.

Figura 2: Superfície de potencial hiperesferica do sistema de três corpos eletrôn, buraco, impureza. Observa-se um poço atrativo para $\Theta_{1,2} = 0$ e $\alpha = \tan^{-1}(1/\sqrt{m})$ da interação eletrôn-buraco. O vale atrativo de $\alpha = 0$ e a barreira repulsiva de $\alpha = \pi/2$ representam respectivamente as interações do eletrôn e do buraco com a impureza.

No limite em que $R=0$ as interações são desprezíveis comparadas com a energia cinética de modo que o operador $U(0; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \Lambda^2$, obedecendo uma equação do tipo,

$$U(0; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) \Phi(0; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = U(0) \Phi(0; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) , \quad (11)$$

sendo $U(0)$ os autovalores e Φ as autofunções, que serão expandidas na base dos esféricos harmônicos generalizados, definidos na forma

$$Y^{LM}(\Omega_1, \Omega_2) = \sum_{l_1, l_2} \sum_{m_1, m_2} \langle LM | l_1, l_2, m_1, m_2 \rangle Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_1) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_2) , \quad (12)$$

onde os termos $\langle LM | l_1, l_2, m_1, m_2 \rangle$ são os coeficientes de Clebsch-Gordon, e $y(\Omega)$ os esféricos harmônicos individuais das partículas 1 e 2. Esta escolha permite diagonalizar simultaneamente os operadores L^2_1 e L^2_2 . Assim, utilizando a ortogonalidade dos $Y(\Omega_1, \Omega_2)$ e substituindo a expansão de Φ ,

$$\Phi(0; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \sum_{l_1, l_2} \sum_{l, l_2} G_{l, l_2}(0; \alpha) Y^{LM}_{l, l_2}(\Omega_1, \Omega_2) , \quad (13)$$

obtem-se uma nova equação que depende apenas da nova função G ,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{\sin^2 \alpha} - \frac{l_2(l_2+1)}{\cos^2 \alpha} - U(0) \right] G_{l_1, l_2}(0; \alpha) = 0 , \quad (14)$$

cujas soluções, obtidas no apêndice B, são os autovalores

$$U_{l_1, l_2}^\mu(0) = -(l_1 + l_2 + 2 + \mu)^2 \quad (\mu=0, 1, 2, \dots) \quad (15)$$

e as autofunções,

$$G(0; \alpha) = (\text{sen} \alpha)^{l_1+1} (\cos \alpha)^{l_2+1} P_{\mu}^{(l_1+1/2, l_2+1/2)}(\cos 2\alpha) \quad (16)$$

onde P_{μ} são polinômios de Jacobi ⁽¹²⁾. Estes resultados obtidos para $R=0$ passam a definir para cada conjunto de números quânticos (l_1, l_2, μ) uma solução do operador U .

D) Tratamento Adiabático

Como já foi observado, a equação de Schrödinger hiperesférica não é completamente separável, uma vez que o operador U possui uma dependência linear da coordenada radial R . O procedimento que será utilizado para tratar este problema baseia-se na solução de U obtida para $R=0$, definindo a equação de autovalores

$$U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) \Phi^{\tau}(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = U^{\tau}(R) \Phi^{\tau}(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) , \quad (17)$$

em que R participa parametricamente de modo que os autovalores $U^{\tau}(R)$ formarão curvas de potencial onde τ representa o conjunto (l_1, l_2, μ) , definido na seção anterior. A função de onda do sistema passa a ser expandida na base das "funções de canal" Φ^{τ} na forma,

$$\Psi = \sum_{\tau} F^{\tau}(R) \Phi^{\tau}(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) , \quad (18)$$

que substituída na eq.(6), e definindo a normalização de Φ^{τ} ,

$$\int \Phi^{\tau}(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2)^* \Phi^{\tau'}(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) d\alpha d\Omega_1 d\Omega_2 = \delta_{\tau}^{\tau'} , \quad (19)$$

leva à equação radial,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{4R^2} + 2E + \frac{U^{\tau}}{R^2} \right] F^{\tau}(R) + \sum_{\tau'} \left[Q^{\tau\tau'}(R) + 2P^{\tau\tau'}(R) \right] F^{\tau'}(R) = 0 , \quad (20)$$

onde $P(R)$ e $Q(R)$ são as constantes de acoplamento não adiabático,

$$Q^{\tau\tau}(R) = \langle \Phi^\tau | \frac{\partial^2 \Phi^\tau}{\partial R^2} \rangle = \int \Phi^\tau \frac{\partial^2 \Phi^\tau}{\partial R^2} d\alpha d\Omega_1 d\Omega_2, \quad (21)$$

$$P^{\tau\tau}(R) = \langle \Phi^\tau | \frac{\partial \Phi^\tau}{\partial R} \rangle = \int \Phi^\tau \frac{\partial \Phi^\tau}{\partial R} d\alpha d\Omega_1 d\Omega_2, \quad (22)$$

Até aqui não foram feitas aproximações. Para a obtenção de resultados numéricos pode-se truncar a expansão das equações acopladas. Neste trabalho despreza-se completamente a mistura de estados de Φ^τ utilizando a chamada aproximação adiabática extrema⁽¹⁹⁾ onde $P(R)=Q(R)=0$. Com isso, obtém-se equações radiais desacopladas para cada estado τ .

III

Soluções Angulares

A) Expansão em Harmônicos Hiperesféricos e Tratamento das Singularidades

Para obter as soluções do operador $U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2)$, ou seja, as funções de onda Φ^T e os autovalores $U^T(R)$, toma-se como base sua solução em $R=0$, definindo,

$$\Phi^T(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \sum_{l_1, l_2} \sum_{l_1', l_2'} G_{l_1, l_2}^T(R; \alpha) Y_{l_1, l_2}^{LM}(\Omega_1, \Omega_2) \sin(\alpha)^{l_1+1} \cos(\alpha)^{l_2+1} \quad (23)$$

Substitui-se a expansão de Φ na equação (17) e, levando em conta a ortonormalidade dos esféricos harmônicos generalizados multiplica-se o lado esquerdo da equação pelo complexo conjugado destes. Integrando em seguida nas variáveis Ω_1 e Ω_2 obtém-se a expressão,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + 2 \left((l_1+1) \cot \alpha - (l_2+1) \tan \alpha \right) \frac{\partial}{\partial \alpha} - (l_1+l_2+2)^2 - U^T(R) + \frac{2RZ}{\sin \alpha} \right. \\ \left. - \frac{2RZ}{\cos \alpha} \right] G_{l_1, l_2}^T(R; \alpha) = 2R \sum_{l_1', l_2'} \sum_{l_1, l_2} C^T(\alpha)_{l_1', l_2', l_1, l_2} G_{l_1', l_2'}^T(R; \alpha) \sin(\alpha)^{l_1-1} \cos(\alpha)^{l_2-1} \quad (24)$$

com,

$$C^T(\alpha)_{l_1, l_2, l_1', l_2'} = - \iint Y_{l_1, l_2}^{*LM} \left[\sin^2 \alpha + \frac{\cos^2 \alpha}{m} - \frac{\sin(2\alpha) \cos(\Theta_{12})}{m^{1/2}} \right]^{-1/2} Y_{l_1', l_2'}^{LM} d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (25)$$

Esta ultima integral foi calculada no apendice A em função dos coeficientes angulares 3-j e 6-j ⁽²⁰⁾:

$$C_{1,1,1,1'}^{(\alpha)} = \sum_J \frac{r_{<}^J}{r_{>}^{J+1}} \begin{pmatrix} 1, 1, J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1, 1, J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1, 1, L \\ 1', 1', J \end{Bmatrix} \left[(2l_1+1)(2l_1'+1) \right. \\ \left. (2l_2+1)(2l_2'+1) \right]^{1/2}, \text{ com os limites,}$$

$$\max(|l_1-l_1'|, |l_2-l_2'|) \leq J \leq \min((l_1+l_1'), (l_2+l_2')),$$

(26)

onde $r_{<} = r_1 = R \sin(\alpha)$ e $r_{>} = r_2 = R \cos(\alpha)/m$ quando $\tan(\alpha) < (1/\sqrt{m})$, enquanto que para $\tan(\alpha) > (1/\sqrt{m})$, $r_{<} = r_2$ e $r_{>} = r_1$. Esta divisão em regiões no termo relativo à interação eletrôn-buraco é devido ao pólo em $\alpha_0 = \tan^{-1}(1/\sqrt{m})$.

Tendo em vista a natureza das equações ate este ponto, define-se a nova variável $\beta = \pi/2 - \alpha$ dividindo o dominio de α nas regiões,

$$\begin{array}{c} 0 \quad \alpha \quad \alpha_0 \quad \beta \quad \pi/2 \\ | \text{-----} | \text{-----} | \\ \text{I} \quad \text{II} \end{array} \quad \begin{array}{l} 0 \leq \alpha \leq \pi/2 \\ 0 \leq \beta \leq \pi/2 - \alpha_0 \end{array},$$

(27)

utilizando as funções de onda $G^I(R; \alpha)$ e $G^I(R; \beta)$, que devem ser continuas no ponto α_0 com derivadas primeiras de sinal oposto,

$$G_{1,1,1,1'}^I(R; \alpha_0) = G_{1,1,1,1'}^I(R; \pi/2 - \alpha_0), \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} G_{1,1,1,1'}^I(R; \alpha_0) = - \frac{\partial}{\partial \beta} G_{1,1,1,1'}^I(R; \pi/2 - \alpha_0),$$

(28)

uma vez que β é função de $-\alpha$. A equação para $G^I(R; \alpha)$ continua sendo a eq.(24), enquanto que para $G^I(R; \beta)$ obtem-se,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} - 2((l_1+1)\tan\beta - (l_2+1)\cot\beta) \frac{\partial}{\partial \beta} - (l_1+l_2+2)^2 - U(R) + \frac{2RZ}{\sin\beta} + \right. \\ \left. - \frac{2RZ}{\cos\beta} \right] G_{l_1, l_2}^T(R, \beta) = 2R \sum_{l_1, l_2} \sum_{l_1', l_2'} c(l_1, l_2, l_1', l_2', \beta) G_{l_1', l_2'}(R, \beta) \sin(\beta)^{l_2-l_2'} \cos(\beta)^{l_1-l_1'} \quad (29)$$

B) Expansão em Séries de Potencias

As equações angulares (24) e (25) são de difícil tratamento numérico devido a seus coeficientes, que são funções de senos e cossenos. Um modo conveniente de resolver este problema sem utilizar aproximações, foi apresentado por Hornos et al⁽¹⁷⁾, e consiste em definir as variáveis x e y ,

$$x = \tan(\alpha/2) \quad \text{e} \quad y = \tan(\beta/2), \quad (30)$$

para as regiões I e II respectivamente, obtendo novas equações do tipo

$$\left[A(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + B(l_1, l_2, x) \frac{\partial}{\partial x} + ZRE(x) + D(l_1, l_2, x) \right] G_{l_1, l_2}^T(R, x) = \\ = R \sum_{l_1, l_2} \sum_{l_1', l_2'} W^{l_1, l_2}(x) G_{l_1', l_2'}^T(R, x), \quad (31)$$

onde os coeficientes, que são agora polinomiais, são da forma,

$$A(x) = x(1+x^2)(1-x^2),$$

$$B(x) = 2(1+x^2)[l_1 x^2 - x^2(4l_2 + 2l_1 + 5) + l_1 + 1],$$

$$D(x) = -4x(1-x^2)[(l_1 + l_2 + 2)^2 + U^T(R)],$$

$$E(x) = 4(1+x^2)(-2x + 1 - x^2),$$

$$W(x) = 2^{l_1-l_1'+3} x^{l_1-l_1'+1} (1+x^2)^{l_1+l_2-l_1'-l_2'} (1-x^2)^{l_2-l_2'+1} C_{l_1, l_2, l_1', l_2'}^T, \quad (32)$$

com os pólos definidos por $A(x)$ para $x=0, \pm i$ e ± 1 . Para evitar instabilidades numericas na obtenção de resultados, transforma-se a função de canal em,

$$G_{1,1}^T(R,x) = (1+x^2)^{(l_1+l_2+2-2\mu)} \text{EXP}(P\alpha) F_{1,1}^T(R,x) . \quad (33)$$

A introdução do 1º termo faz com que a solução para $R=0$ seja finita, o que pode ser facilmente observado no apêndice B. O 2º termo é utilizado para impedir possíveis instabilidades quando R atinge grandes valores, utilizando $P=-ZR/n$ ($n=1,2,3,\dots$). Estas instabilidades não apareceram na maioria das aplicações deste método (seção V), mas tem atrapalhado outros trabalhos de três corpos^(12,14,15,16). A eq.(31) assume a nova forma,

$$\left[\bar{A}(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \bar{B}(x) \frac{\partial}{\partial x} + \bar{D}(x) + 2Z\bar{E}(x) \right] F_{1,1}^T(R,x) = R \sum_{1,1,2,1,1',2,1,1'} \bar{W}^T(x) F_{1,1}^T(R,x) \quad (34)$$

com os coeficientes,

$$\bar{A}(x) = A(x),$$

$$\bar{B}(x) = B(x) + x(1-x^2)4(xS+p),$$

$$\bar{D}(x) = D(x) + B(x)2(xS+P)(1+x^2)^{-1} + [x(1-x^2)(-4Px+4x^2S(S-1) + 8xSP+4P^2) + 2Sx(1-x^2)],$$

$$\bar{E}(x) = E(x),$$

$$\bar{W}^T(x) = W^T(x) (1+x^2)^{s-s}, \text{ com } (s=l_1+l_2+2-2\mu). \quad (35)$$

Para resolver este sistema de equações diferenciais escolhe-se o método da expansão em series de potencia da função de onda fazendo,

$$F_{1,1_2}^T(R,x) = \sum_{n=1}^{\infty} H_{1,1_2}^T(R,n)x^{n-1}. \quad (36)$$

Substituindo a eq. (36) na eq. (34) obtem-se a série de recorrência,

$$\begin{aligned} H^T(R,n+1)A^1(n) &= H^T(R,n)A^0(n) + H^T(R,n-1)A^{-1}(n) + H^T(R,n-2)A^{-2}(n) + \\ &+ H^T(R,n-3)A^{-3}(n) + H^T(R,n-4)A^{-4}(n) + H^T(R,n-5)A^{-5}(n), \end{aligned} \quad (37)$$

onde,

$$\begin{aligned} A^1(n) &= n(n+2l_1+1), \\ A^0(n) &= -4[P(n+1_1)-ZR], \\ A^{-1}(n) &= -[(n-2)(n-11-8l_2-2l_1+4s)-8ZR-4(l_1+l_2+2)^2-8sl_1-24s+ \\ &\quad -4P^2-8ZR], \\ A^{-2}(n) &= 4P(4l_2-2s+2l_1+6), \\ A^{-3}(n) &= -[-(n-4)(n+5+8l_2+2l_1)+4(l_1+l_2+2)^2+4U^T(R)+ \\ &\quad +4s^2-16sl_2-8sl_1-24s-4P^2-8ZR], \\ A^{-4}(n) &= 4P(n-5)+4P(l_1-2s+1)-4ZR, \\ A^{-5}(n) &= (n-6)(n-7-2l_1+4s)-4sl_1+4s^2-2s. \end{aligned} \quad (38)$$

No caso de ser necessario introduzir na função de canal o termo $\text{Exp}(px)$ pode-se utilizar de modo alternativo a função $\text{Exp}(px)$, que além de possibilitar uma convergencia mais rapida na expansão em x , fornece uma função de canal de facil normalização.

C)

Limite Assintótico ($R \rightarrow \infty$)

Para grandes valores de R o sistema se encontra ionizado, com o elétron e a impureza formando um estado ligado e o buraco espalhado. Nesta situação $\alpha \rightarrow 0$ pois $r_2 \rightarrow \infty$ e $\tan(\alpha) = r_1 / (r_2 \sqrt{m})$, o que permite expandir os termos do operador U (eq.(9)) obtendo,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} U(R; \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = \frac{d^2}{d\alpha^2} - L_1^2 \left(\frac{1}{\alpha^2} + \frac{1}{3} + \frac{\alpha^2}{15} + \dots \right) - L_2^2 \left(1^2 + \alpha + \dots \right) + 2ZR \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{\alpha}{6} + \dots \right) - 2Rm^{1/2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} + \dots \right) + 2R \left(m^{1/2} + m \cos(\Theta_{1,2}) \alpha + \dots \right) \quad (39)$$

A seguir faz-se a mudança de variável $\rho = R\alpha$ e aplica-se o operador U na função de canal $\tilde{\Phi}^T$ obtendo a equação de autovalores,

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2m^{1/2}(Z-1)}{R} + \frac{2Z}{\rho} - \frac{L_1^2}{\rho^2} - \frac{U^T(R)}{R^2} - \frac{a}{R^2} \dots \right] \tilde{\Phi}^T(R, \alpha, \Omega_1, \Omega_2) = 0 \quad (40)$$

Este procedimento deriva da definição da coordenada do elétron, onde $r_1 = R \sin(\alpha)$, que para $\alpha \ll 1$ é aproximado para $r_1 = R\alpha$, e é dominante num sistema em que o buraco está livre, fora do alcance do potencial e, como era de se esperar, a equação resultante é hidrogenóide,

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{L_1^2}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - K(R) \right] \tilde{\Phi}(\rho, \Omega_1) = 0 \quad (41)$$

onde a função K engloba todas as componentes de U que dependem de R . A solução da eq.(41) é o conhecido resultado $k = Z^2/n^2$ ($n=1,2,3,\dots$). Deste modo obtém-se a expressão da curva de potencial no limite assintótico,

$$\frac{U^T(R)}{R^2} = -\frac{Z^2}{n^2} - \frac{2\sqrt{m}(Z-1)}{R} - \frac{a}{R^2} - \frac{b}{R^3} \quad (42)$$

D) Resultados Práticos e Limitações da Solução Angular

Os autovalores, $U^T(R)$, do operador U formam curvas de potencial devido sua dependência paramétrica em R , e são definidas por seu valor no limite $R=0$, como visto, $U^T(0) = -(l_1 + l_2 + 2 + 2\mu)^2$. Como os sistemas em estudo pertencem ao estado fundamental, $L=0$, impõe-se a condição $l_1 = l_2$, fazendo com que as curvas sejam definidas conforme o esquema abaixo.

l_1	l_2	μ	$-U(0)$	
0	0	0	4	→ estado fundamental
0	0	1	16	
0	0	2	36	
1	1	1	36	

Um exemplo prático das duas primeiras curvas é mostrado na fig.(3)

Figura 3: curvas de potencial do sistema de três corpos

Um teste importante da precisão dos resultados consiste em observar o comportamento assintótico de $U^{\tau}(R)/R^2$ que, neste trabalho, deve ser da forma $-1/n^2 - 1/R^2$, pois as aplicações envolvem impurezas com $Z=1$. Na fig(4) observa-se as curvas de $n=1$ e 2 , tendendo respectivamente para -1 e -0.25 , que são as energias de ionização.

Figura 4: curvas de potencial dos estados $\tau = 1$ e 2 para sistemas de três corpos com $m=6$ e $Z=1$.

A precisão das soluções angulares é limitada a duas expansões: uma nos momentos angulares l_1 e l_2 e outra em séries de potencia nas variáveis x e y . A primeira (eq.(24)) é truncada em $l_1, l_2 \leq l_{\text{corte}}$, sendo que o comportamento das curvas para $l_{\text{corte}} = 4, 5, 6, 7$ e 8 na figura (5), mostra que é rapidamente convergente.

Figura 5: comportamento da curva de potencial do estado fundamental ($\tau=1$) para o sistema com $m=6$ e $z=1$ com relação ao corte na soma de momentos angulares no termo da interação. As curvas, a partir da menos profunda, correspondem a $l_{\text{corte}}=4, 5, 6, 7$ e 8 , respectivamente.

A expansão da função de canal em séries de potências é sensível à massa m , que para os sistemas excitônicos tratados aqui envolvem $m > 1$. O efeito da massa fica claro na figura (6) onde mostra-se a região de expansão em função dos pólos $\pm i$, ± 1 e 0 da eq.(34).

Figura 6: regiões de expansão da função de canal em séries de potências nas variáveis x para a região I (fig.6A) e y para a região II (fig.6B).

No exemplo, onde utilizou-se $m=6$, a fig.(6A) mostra a região I que é convergente com $ncorte = 40$, enquanto que na região II esta se dá em $ncorte = 100$. Este método começa a falhar com $m > 50$, devido a necessidade de grandes valores de $ncorte$ tornando a obtenção de resultados muito lenta, impedindo o tratamento de sistemas moleculares que, por exemplo, no caso do H_2^+ onde $m=1836$ $ncorte$ é da ordem de 8000 termos.

IV Solução da Equação Radial e Obtenção da Energia do sistema

Obtidos os auto valores da equação angular (secção III), passa-se a resolver a equação radial, definida na forma abaixo, onde deve-se lembrar que a solução angular possui uma dependência da coordenada radial, R,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{4R^2} + 2E + \frac{U^\tau(R)}{R^2} \right] F^\tau(R) + \sum_{\tau'} \left[Q^{\tau\tau'}(R) + 2P^{\tau\tau'}(R) \right] F^{\tau'}(R) = 0 .$$

A soma no índice (τ) corresponde a mistura dos estados definidos na solução da curva de potencial no limite de $R=0$. Na aproximação adiabática extrema, anulam-se os termos $Q(R)$ e $P(R)$, definidos nas equações 21 e 22, que são os termos de acoplamento dos diversos estados do sistema. Nesta aproximação a equação radial passa à seguinte forma,

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{U^\tau(R)+1/4}{R^2} + 2E \right] F^\tau(R) = 0 ,$$

(43)

que corresponde a uma equação diferencial que pode ser resolvida por métodos de propagação da função de onda, desde que se conheçam as condições de contorno. Com este objetivo passa-se a resolver a equação para os limites de $R \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$. Com estes resultados obtém-se computacionalmente a energia E e a função de onda $F^\tau(R)$ correspondente.

A) Função de Onda no Limite de $R \rightarrow 0$

Para $R \rightarrow 0$, a equação radial (41) diverge, de forma que tendo em vista as soluções numéricas, faz-se a transformação abaixo na função de onda,

$$F^\tau(R) = R^s \eta(R) .$$

(44)

Para este limite a curva de potencial tem o valor $U^\tau(0)$ (ver acima) de forma que substituindo a expansão acima obtém-se $s = U^\tau(0) + 1/2$.

Com isto a equação radial que sera resolvida é a seguinte,

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{2(m+1/2)}{R} \frac{d}{dR} + \left(\frac{U^T(R)+1/4}{R^2} + 2E + \frac{m^2-1/4}{R^2} \right) \right] \eta(R) = 0 . \quad (45)$$

Para que sejam obtidas as condições iniciais para a propagação da equação (45) expande-se a curva de potencial e a função de onda $\eta(R)$ em séries de taylor na forma abaixo,

$$U^T(R) = U^T(0) - u_1 R - u_2 R^2 - u_3 R^3 - \dots , \quad (46)$$

$$\eta(R) = \eta_0 + \eta_1 R + \eta_2 R^2 + \eta_3 R^3 + \dots ; \quad (47)$$

substituindo-se esta expansão na equação (45) obtem-se o valor dos coeficientes η_i em função dos coeficientes da expansão da curva de potencial, que por sua vez são obtidos computacionalmente. Estes coeficientes relacionam-se da seguinte maneira,

$$\eta_1 = \frac{u_1 \eta_0}{2m + 1} , \quad (48)$$

$$\eta_2 = \frac{(u_2 - 2E) + u_1 \eta_1}{4(m + 1)} , \quad (49)$$

$$\eta_3 = \frac{(u_3 \eta_0 + (u_2 - 2E)\eta_1 + u_1 \eta_2)}{3(2m + 3)} , \quad (50)$$

com, $m^2 = U^T(0)$.

B)

Função de Onda no Limite de $R \rightarrow \infty$

Sabendo da anulação da função de onda radial neste limite, espera-se um decaimento exponencial que pode ser separado da função de onda fazendo-se a seguinte transformação,

$$F(R) = R^s e^{-kR} \eta(R) \quad (51)$$

com $s = m + 1/2$. Com esta transformação a equação radial a ser propagada e dada por:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + 2 \left(\frac{s - kR}{R} \right) - \frac{2ks}{R} + \left(\frac{(kR)^2 - 2kRs + S(s-1) + U^T(R) + 1/4}{R^2} \right) + 2E \right] \eta(R) = 0 \quad (52)$$

A condição de contorno de $R \rightarrow \infty$ para a propagação desta equação é obtida utilizando-se a função da curva de potencial neste limite, obtida na seção III C,

$$U^T(R) = \frac{Z^2}{n^2} - \frac{m^{1/2}(Z-1)}{R} - \frac{a}{R^2} - \frac{b}{R^3} + \dots, \quad (53)$$

e expandindo-se a função de onda em séries de potencia,

$$\eta(R) = \eta_0 + \frac{\eta_1}{R} + \frac{\eta_2}{R^2} + \frac{\eta_3}{R^3} + \dots \quad (54)$$

A substituição destas expressões na equação radial fornecem os coeficientes ,

$$K^2 = Z^2/n^2 - 2E, \quad (55)$$

$$\eta_1 = \eta_0 [a - (s-1/2)^2] / 4K , \quad (56)$$

$$\eta_2 = [\eta_1 (a - (s-1/2)^2) + b\eta_0 - 2\eta_1] / 4K , \quad (57)$$

$$\eta_3 = [\eta_2 (a - (s - 1/2)^2 - 6) + (b + 2\eta_1)] / 6K . \quad (58)$$

V Aplicações

O desenvolvimento teórico do sistema de três corpos realizado neste trabalho, permite a análise das soluções hiperesféricas radiais e angulares para qualquer valor de $m=m_2/m_1$, onde m_2 é a massa efetiva do buraco e m_1 a massa do elétron, desde que esteja no limite $1/50 < m < 50$, pois nesta região a expansão em séries de potência da função de onda angular é convergente. Para a expansão nos momentos l_1 e l_2 utilizou-se 8 termos, e para a carga da impureza, $Z=1$.

Na seção A mostra-se o comportamento geral destes sistemas no estado fundamental, apresentando energias de ligação, curvas de potencial e funções de onda radiais. Na seção B testa-se a precisão das aproximações comparando as energias de ligação de vários sistemas excitônicos com resultados obtidos pelo método variacional. Uma das vantagens deste método consiste na obtenção de curvas de potencial no contínuo. A primeira destas curvas é analisada na seção C. Na seção D fez-se um estudo com relação a região de massa crítica, que corresponde a um limite a partir do qual o sistema não apresenta energia de ligação abaixo da energia de ionização. Na última seção faz-se uma simulação de confinamento do sistema. Este estudo é possível impondo o anulamento da função de onda radial no limite desejado.

A) Energia de Ligação e Curvas de Potencial do Estado Fundamental

O único parâmetro que diferencia as equações dos sistemas de 3 corpos desenvolvidas neste trabalho é $m=m_2/m_1$, de forma que foi possível a análise das soluções angulares e radiais desde sistemas moleculares com $m=50$, até atômicos, com $m=1$. As curvas de potencial na fig.(7) mostram as soluções angulares.

Figura 7: comportamento geral das curvas de potencial para $\tau=1$ em função de $m=m_2/m_1$.

As funções de onda radiais na fig.(8), relativas as curvas da fig.(7), indicam uma dispersão menor quanto maior o valor de m .

Figura 8: funções de onda radiais com relação as curvas da fig.7.

Os autovalores das funções de onda radiais são as energias dos sistemas. Na fig.(9) estão plotadas para cada valor de m a taxa da energia com relação a energia de ionização, ou seja, a taxa de quanto abaixa a energia de ligação do sistema hidrogenóide eletrôn-impureza, E_b , caso passe a formar um estado ligado de 3 corpos com o buraco,

$$\Delta E = -(E - E_b) / E_b \quad ,$$

onde E é a energia do sistema e E_b a energia hidrogenóide no limite em que o sistema esta ionizado.

Figura 9: taxas das energias de ligação do estado fundamental com relação a energia de ionização para sistemas com diferentes valores de m .

B)

Funções de Onda no Contínuo

As soluções angulares são definidas pelo conjunto de índices l_1, l_2, μ (seção IV), que no item anterior, onde tratou-se do estado fundamental, correspondia a $l_1=l_2=\mu=0$, obtendo energias de ligação abaixo da energia de ionização -1 (nas unidades adimensionais). Agora o objetivo consiste em estudar as soluções para a segunda curva, onde $l_1=l_2=0$ e $\mu=1$. Na fig. (10) desenhou-se a 1ª e a 2ª curva de potencial na forma $U(R)/R^2$ para o semicondutor ZnSe onde $m=6$. As linhas horizontais representam as energias de ligação.

Figura 10: energia do estado fundamental e dez ressonâncias para o sistema de três corpos no semicondutor ZnSe.

Para a primeira curva, como foi observado, obteve-se apenas uma energia de ligação, enquanto que para a segunda dez valores de energia, cujas funções de onda são representadas na figura 11.

Figura 11: funções de onda radiais de seis ressonâncias no semicondutor ZnSe.

As energias correspondentes são as seguintes:

ESTADOS (L=0)	ENERGIA (meV)
1s	17.18
2s	11.50
3s	10.10
4s	9.07
5s	8.31
6s	7.65
7s	6.96
8s	6.24
9s	5.52
10s	4.83
11s	4.19

Tabela 1: energia dos estados de momento angular total L=0 para excitons ligados a impurezas no semiconductor ZNSE.

Os estado ligados obtidos na segunda curva de potencial são ditos pseudo estacionários por serem de energia acima do primeiro potencial de ionização. Estes estados autoionizantes decaem, pela emissão do buraco, para o estado fundamental formado pela impureza e o eletrôn. No caso acima o primeiro potencial de ionização corresponde à energia $-z^2/n^2$ com $z=1$ e $n=1$. A transformação deste valor para eV é feita na forma abaixo:

$$E(\text{eV}) = E_0 * M_e / \epsilon^2 \quad (53)$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, 13.605 eV, M_e a massa efetiva do eletrôn em massas eletrônicas e ϵ a constante dielétrica do material semiconductor (tabela 2).

C)

Energia de Ligação em Semicondutores

Os sistemas de equação desenvolvidos foram aplicados para materiais semicondutores no qual o modelo de três corpos seja valido, e comparados com resultados obtidos pelo método variacional. As curvas de potencial de vários materiais e suas funções de onda estão nas figuras 12 e 13 respectivamente.

Figura 12: curvas de potencial de excitons ligados a impurezas doadoras nos semicondutores InSb(mais profunda), ZnSe, CdS e crit($m=2.34$)

Figura 13: funções de onda radiais referentes a fig.12

Abaixo está a tabela com os resultados gerais comparados com os resultados mencionados. A precisão do método adiabático utilizado neste trabalho pode ser observada no erro da ordem de 1%.

MATERIAL	ϵ	M_1	M_2	m	E (meV)	ΔE_z	E (meV) ¹	ΔE_z ¹
INSB	16.8	0.02	0.3	14.9	1.0534	9.26	1.0634	10.3 ¹
ZNSE	9.1	0.1	0.6	5.99	17.181	4.57	17.106	4.12 ¹
CDS	10.3	0.2	1.0	5.0	33.42	3.60	33.26	3.1 ²
ZNO	8.5	0.24	1.14	4.76	72.73	3.35	72.27	2.7 ²
CDSE	10.7	0.13	0.59	4.55	16.076	3.12	15.938	2.23 ²
CRIT				2.34		0.73		

Tabela 2: Resultados obtidos para energias do estado fundamental de excitons ligados a impurezas em vários semicondutores, comparados com valores obtidos pelo método variacional nas referências 6 e 7: índices 1 e 2 nesta tabela. Os valores de M_2 e M_1 são calculados em massas eletrônicas, e ϵ é a constante dielétrica e os dados de $\Delta E(z)$ são relativos à taxa da energia de ligação pela energia de ionização do sistema (equação 59). O material de massa 2.34 corresponde ao de massa crítica (ref-7).

Construiu-se na figura 14 uma curva derivada de nossos resultados onde estão plotados os resultados variacionais das referências 6 e 7. Esta curva está na forma $\Delta E(z)$ contra $1/m$, conforme desenhada na ref-6.

Figura 14: energia de ligação do estado fundamental contra $1/m$, onde os pontos fora da curva representam resultados obtidos por métodos variacionais.

D)

Massa Crítica e Deslocalização

Massa crítica corresponde à relação $m=m_c/m_1$, para a qual a energia de ligação do estado fundamental seja maior ou igual que a energia de ionização, ou seja, para a qual o buraco não se ligue ao sistema eletrôn-im-pureza. Na ref.(7) estima-se para a massa crítica um valor próximo de $m=2.35$. Analizando esta região nota-se que as curvas de potencial, como pode-se observar na figura abaixo, passam a ficar menos profundas com a diminuição de m .

Figura 15: curvas de potencial para o limite de deslocalização. A curva mais profunda é a de $m=2.34$.

As funções de onda radiais correspondentes podem ser observadas na fig. (16), onde as curvas são mais dispersas quanto menor o valor de m .

Figura 16: funções de onda radiais referentes às curvas da fig.15.

Esta dispersão fica clara quando se calcula o raio hiperesférico médio do sistema em função de m . O resultado na fig.(17) mostra, como era de se esperar, que de grandes valores de m , à níveis moleculares, o raio médio diminui quando m passa a níveis atômicos. Mas, para valores de $m \leq 5$, onde ocorre um mínimo, o raio médio passa a divergir. Este fenômeno ocorre devido a pequena profundidade do poço de potencial que não é suficiente para manter o sistema localizado, ocorrendo então a dispersão observada na função de onda radial. Esta deslocalização mostra que a "região crítica" para $m < 5$ em problemas reais em semicondutores ocorre também devido ao "tamanho medio" do sistema que faz com que a aproximação da massa efetiva não seja mais valida, além de que fica mais facil a interferencia de perturbações nos resultados. Na figura ao lado mostra-se com a energia do sistema varia com o raio médio.

Figura 17: comportamento do raio médio hiperesférico em função de m .

Figura 18: comportamento do raio médio hiperesférico em função da energia de ligação para sistemas com diferentes valores de m .

E)

Confinamento

Na estrutura das equações desenvolvidas no texto, a solução angular é função da coordenada radial R de uma forma paramétrica. Desta forma, pode-se simular o confinamento do sistema impondo-se o anulamento da função de onda radial em qualquer valor de R , sem que a solução angular seja alterada. Escolheu-se um dos materiais semicondutores no qual o sistema impureza-exciton foi resolvido, e graficou-se o comportamento do raio médio do sistema e da energia de ligação em função do raio de confinamento.

Figura 19: comportamento do raio médio do sistema de três corpos no material ZnSe, com relação ao raio de confinamento hiperesférico

Figura 20: comportamento da energia de ligação do sistema de três corpos no material ZnSe, em função do raio de confinamento hiperesférico.

Pode-se observar que a energia de ligação varia lentamente até o valor da energia de ionização, a partir do qual passa a aumentar rapidamente, uma vez que o buraco não forma mais estado ligado com a impureza e o elétron.

Desenvolveu-se neste trabalho as equações de autovalores para o problema de três corpos com coordenadas hiperesfericas utilizando o procedimento adiabatico. As equações foram resolvidas para valores genericos da massa do eletrón e do buraco, sendo que todos os calculos para as soluções radiais e angulares são exatos. As aproximações são introduzidas na resolução numerica das equações na soma de momentos angulares no termo referente a interação eletrón-buraco, e, ao desprezar o acoplamento das funções de onda angulares na equação radial adotando a aproximação adiabatica extrema.

O metodo demonstrou impedir instabilidades numericas para qualquer valor da coordenada R ate o limite $M_b=50M_e$, inclusive para soluções no continuo, obtendo ressonancias. As energias de ligação do estado fundamental obtidas para excitons ligados a impurezas doadoras em diversos materiais semicondutores apresentaram erros inferiores a 1% de resultados precisos obtidos pelo metodo variacional, o que demonstra a validade da aproximação adiabatica extrema onde desacopla-se as equações radiais.

Uma das analizes realizadas neste trabalho e a da região de massa critica, que corresponde a valores de $m=M_b/M_e$ para os quais o sistema não forme um estado ligado de três corpos. Para esta região observou-se que não existe um valor para a massa critica, obtendo valores da energia de ligação para qualquer m , mas os resultados mostram que o tamanho medio do sistema diverge quanto menor m , fazendo com que o modelo de massa efetiva não seja mais valido, alem de que as baixas energias de ligação deixam o sistema sensivel a perturbações que não foram levadas em conta em nosso modelo.

O proximo passo deste trabalho consiste em introduzir os efeitos de centro de massa, que foram desprezados atribuindo massa infinita a impureza, e desenvolver a tecnica para resolver sistemas moleculares. A seguir passa-se a generalizar o metodo das coordenadas hiperesfericas para tratar problemas de quatro corpos e efeitos de campos externos.

Apendice

A) Cálculo da Interação Eletron-Buraco

Deseja-se calcular o termo abaixo, que corresponde a interação das partículas (1) e (2). Este termo fornecerá os elementos não diagonais da equação angular uma vez que mistura os elementos da base de momento angular total na qual expandiu-se as funções de canal.

$$C(l_1, l_2, l'_1, l'_2) = \iint Y_{l_1, l_2}^{*LM} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} Y_{l'_1, l'_2}^{LM} d\Omega_1 d\Omega_2, \quad (60)$$

onde,

$$Y_{l_1, l_2}^{LM} = \sum_{m_1, m_2} \langle L, M | l_1, l_2, m_1, m_2 \rangle Y_{l_1, m_1}^{m_1} Y_{l_2, m_2}^{m_2} \quad (61)$$

é o momento angular total expandido em função dos momentos angulares das partículas (1) e (2), relacionados pelos coeficientes de Clebsch-Gordon. Para que se resolva a equação (60) expande-se a interação em esféricos harmônicos,

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \sum_J \sum_{m_J} \frac{r_{<}^J}{r_{>}^{J+1}} Y_J^{m_J}(\Omega_1) Y_J^{m_J}(\Omega_2) (-1)^{m_J} \frac{4\pi}{(2J+1)} \quad (62)$$

onde $r_{<}$ e $r_{>}$ são r_1 e r_2 para $\tan \alpha < \sqrt{m}$ e r_2 e r_1 para $\tan \alpha > \sqrt{m}$. No desenvolvimento do cálculo ocorrerão produtos dos coeficientes de Clebsch-Gordon, de forma que torna-se apropriada a utilização dos coeficientes (3-j), (ref-20), dados abaixo,

$$\langle L, M | m_1, m_2, l_1, l_2 \rangle = (2L+1)^{1/2} (-1)^{l_1 - l_2 + M} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Substituindo-se estes valores na (eq.60) obtem-se,

$$C = \sum_{J, r} \frac{r_{<}^J}{J+1} \frac{4\pi}{2J+1} (-1)^{l_1+l_1'-l_2-l_2'} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1', m_2' \\ m_3}} (-1)^{m_1'+m_2'+m_3} \begin{pmatrix} l_1, l_2, L \\ m_1, m_2, -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1, l_2', L \\ m_1, m_2', -M \end{pmatrix} I_1 I_2 \quad (64)$$

onde,

$$I_1 = \int Y_{l_1, m_1}^{m_1'} Y_{l_1, m_1'}^{m_1} Y_J^{m_3} d\Omega_1 = \left[\frac{(2l_1+1)(2l_1'+1)(2J+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l_1, l_1', J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1, l_1', J \\ m_1, -m_1, -m_3 \end{pmatrix} \quad (65)$$

$$I_2 = \int Y_{l_2, m_2}^{m_2'} Y_{l_2, m_2'}^{m_2} Y_J^{m_3} d\Omega_2 = \left[\frac{(2l_2+1)(2l_2'+1)(2J+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l_2, l_2', J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2, l_2', J \\ m_2, -m_2, -m_3 \end{pmatrix} \quad (66)$$

assim o termo de interação assume a forma,

$$c = \sum_{J, r} \frac{r_{<}^J}{J+1} (-1)^{l_1+l_1'-l_2-l_2'} (2L+1) \begin{pmatrix} l_1, l_1', J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2, l_2', J \\ 0, 0, 0 \end{pmatrix}$$

$$[(2l_1+1)(2l_1'+1)(2l_2+1)(2l_2'+1)]^{1/2} F,$$

onde,

$$F = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1', m_2' \\ m_3}} (-1)^{m_1'+m_2'+m_3} (2L+1) \begin{pmatrix} l_1, l_2, L \\ m_1, m_2, -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1, l_1', J \\ m_1, -m_1, m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2, l_2', J \\ m_2, -m_2, m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1, l_2, L \\ m_1, m_2, -M \end{pmatrix} \quad (67)$$

Faz-se a seguinte transformação nos coeficientes 3-j,

$$\begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ m_1' & m_2' & -M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_2' & l_1' & L \\ m_2' & m_1' & -M \end{pmatrix} (-1)^{l_1'+l_2'+L} = \begin{pmatrix} l_2' & l_1' & L \\ m_2' & m_1' & M \end{pmatrix} ,$$

$$\begin{pmatrix} l_1' & l_1' & J \\ m_1' & -m_1' & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1' & J & l_1' \\ m_1' & -m_3 & m_1 \end{pmatrix} ,$$

$$\begin{pmatrix} l_2' & l_2' & J \\ m_2' & -m_2' & -m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & l_2' & l_2' \\ m_3 & -m_2' & m_2 \end{pmatrix} (-1)^{l_2'+l_2'+J} ,$$

$$\begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ m_1' & m_2' & -M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ m_1' & m_2' & M \end{pmatrix} (-1)^{l_1'+l_2'+L} ,$$

(68)

obtendo-se ,

$$F = (-1)^{L+l_1'+l_1'} \sum_{\substack{m_1' m_2' \\ m_1' m_2' \\ m_3}} (-1)^{m_1'+m_2'+m_3+J+l_2'+l_1'} \begin{pmatrix} l_2' & l_1' & L \\ m_2' & -m_1' & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1' & J & l_1' \\ m_1' & -m_3 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & l_2' & l_2' \\ m_3 & -m_2' & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ m_1' & m_2' & M \end{pmatrix} ,$$

(69)

que corresponde a definição do coeficiente de momento angular 6-j,

$$F = \frac{1}{2L+1} \begin{Bmatrix} l_1' & l_2' & L \\ l_2' & l_1' & J \end{Bmatrix} (-1)^{L+l_1'+l_1'} .$$

(70)

Finalmente obtem-se,

$$C(l_1, l_2, l_1', l_2') = \sum_{J, r} \frac{r!}{r!} \begin{pmatrix} l_1 & l_1' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_2' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_1' & l_2' & J \end{Bmatrix} [(2l_1+1)(2l_1'+1) \\ (2l_2+1)(2l_2'+1)]^{1/2} .$$

(71)

B) Comportamento da Solução Angular no Limite $R \rightarrow 0$

Com $R=0$, a equação 11 assume a forma abaixo, onde nota-se que neste limite todos os potenciais são desprezíveis se comparados com os termos de energia cinética.

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{\sin^2 \alpha} - \frac{l_2(l_2+1)}{\cos^2 \alpha} - U^T(0) \right] G_k^T(0, \alpha) = 0 .$$

(72)

Introduz-se a coordenada $\lambda=2\alpha$, obtendo-se,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} - \frac{4l_1(l_1+1)}{16\sin^2 \lambda/2} - \frac{4l_2(l_2+1)}{16\cos^2 \lambda/2} - \frac{1}{4} U^T(0) \right] G_k^T(0, \lambda) = 0 ,$$

(73)

que, comparando-se com a forma canônica das equações de Jacobi,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{1-4a^2}{16\sin^2 \lambda/2} + \frac{1-4b^2}{16\cos^2 \lambda/2} + \left(\mu + \frac{a+b+1}{2} \right)^2 \right] Q_{\mu}^{(a,b)}(\cos \lambda) = 0,$$

(74)

que tem como solução,

$$Q_{\mu}^{(a,b)}(\cos \lambda) = (\sin \lambda/2)^{a+1/2} (\cos \lambda/2)^{b+1/2} P_{\mu}^{(a,b)}(\cos \lambda) ,$$

(75)

observa-se que, $a=l_1+1/2$ e $b=l_2+1/2$. Assim, as curvas de potencial em $R=0$ possuem a forma,

$$U^T(0) = - (2\mu + l_1 + l_2 + 2)^2, \quad (76)$$

com as funções canal :

$$G^T(0, \alpha) = (\sin \alpha)^{l_1+1} (\cos \alpha)^{l_2+2} P^{(l_1+1/2, l_2+1/2)}(\cos 2\alpha). \quad (77)$$

Os polinômios de Jacobi P são definidos da seguinte forma,

$$P_{\mu}^{(a,b)}(\cos 2\alpha) = d_{\mu} \sum_{m=0}^{\mu} c_m (\cos 2\alpha - 1)^{\mu-m} (\cos 2\alpha + 1)^m, \quad (78)$$

(os coeficientes d_{μ} e c_m são definidos na ref-(8), que equivale a,

$$P_{\mu}^{(a,b)}(\cos 2\alpha) = d_{\mu} \sum_{m=0}^{\mu} c_m (-1)^{\mu-m} (2)^{\mu} (\sin \alpha)^{\mu-m} (\cos \alpha)^m. \quad (79)$$

Com isso pode-se obter as funções canal na variável $x = \operatorname{tg} \alpha / 2$.

$$G_k^T(0, x) = (1+x^2)^{-(l_1+l_2+2+\mu)} d_{\mu} \sum_{m=0}^{\mu} c_m (-1)^{\mu-m} (2)^{\mu} (2x)^{\mu-m} (1-x^2)^m, \quad (80)$$

onde, $s = (l_1 + l_2 + 2 - 2\mu)$.

Bibliografia

1. J.J. Hopfield, Proceedings of the seventh International Conference on the Physics of Semicondutor, Paris, 1964(Dundod,Paris,1964,P.725)
2. M.A. Lampert, Phys. Rev. Letters 1, 450 (1958)
3. R.R. Sharma and S. Rodriguez, Phys. Rev. 153,823 (1967)
4. H.J. Wunshe and K. Henneberger, Phys. Stat. Sol. (B) 91,336 (1979)
5. A. Kasuya,T. Goto,Y. Nishina,S. Satoh,K. Igaky, J. Phys. Soc. JPN (Japan) vol.49, suppl. A, 433 (1980)
6. M. Suffczynski,W. Gorzkowski,R. Kowalczyk, Phys. Letters 24A, 453 (1967)
7. T.Skettrup,M. Suffczynski,W. Gorzkowski, Phys. Rev. B4, 512 (1971)
8. L. Eming and I. Egry, Sol. Stat. Commun., vol 68, n^o 11, 981 (1988)
9. J.H. Macek, J. Phys. B1, 831 (1968)
10. See S. Y. Larsen, in Few-Body Methods: Principles and Applications edited by T.K. Lim,C.G. Bao,D.P. Hou,and S. Huber (World Scientific, Singapore, 1986)
11. V.P. Brito, H. T. Coelho and T. K. Das, Phys. Rev. A 40, (1989)
12. C. H. Greene, Phys. Rev. A 26, 2974 (1982)
13. U. Fano, Rep. Prog. Phys. 46, 97 (1983)
14. C.D. Lin, Adv. Mol. Phys. 22, 77 (1986)
15. Zheng Zhen and J. Macek, Phys. Rev. A 34, 838, (1986)
16. C.D. Lin, Xian-Hu Liu, Phys. Rev, 437, 2749 A (1988)
17. J.E. Hornos,S.W. MacDowell and C. Denise Caldwell, Phys. Rev. A 33, 2212 (1988)
18. M.Abramowitz e Irene A. Stegun,Handbook of Mathematical Functions (1965)

19. J.E. Hornos and H. T. Coelho, to be published.

20. A. Messiah, Quantum Mechanics Vol.2 3^a ed.(1965)