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

ESTUDOS DOS ESTADOS ELETRÔNICOS EM SISTEMAS QUASE-UNIDIMENSIONAIS

Salviano de Araujo Leão

Tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Doutor em Ciências "Física Básica"

USP / IFQSC / SBI
8-2-001126

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Marcos Henrique Degani*

SÃO CARLOS – 1997

Leão, Salviano A.

Estudo dos estados eletrônicos em sistemas quase-unidimensionais /Salviano A. Leão.–São Carlos, 1997.

113 p.

Tese (Doutorado)–Instituto de Física de São Carlos, 1997.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Henrique Degani

1. Semicondutores. 2. Sistemas quase-unidimensionais. 3. Propriedades eletrônicas e de transporte. I. Título.

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 272-6222
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **SALVIANO DE ARAÚJO LEÃO** APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 22/01/1997.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani (USP)

Profa. Dra. Marilia Junqueira Caldas/IFUSP

Profa. Dra. Maria Cristina dos Santos/UNICAMP

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques/UFSCar

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriati Júnior/IFSC-USP

Aos meus pais Edmar e Rosa,
a minha tia Luzia e a minha esposa Sylvia.

Agradecimentos

- Ao professor Dr. Marcos H. Degani pela sugestão do tema, orientação segura e pelo apoio nos momentos que se fizeram necessários.

- Ao professor Dr. Oscar Hipólito por seu apoio.

- Aos professores Dr. Valmir A. Chitta e Dr. Lidério C. Ioriatti Jr. pelas proveitosas discussões.

- Aos amigos Márcio Adriano R. Souza e Washington L. C. Lima pelas discussões e sugestões que muito contribuíram para a realização desse trabalho.

- A todos os colegas do IFSC-USP pelo ótimo clima de trabalho.

Este trabalho foi financiado pela **FAPESP** *e contou com o apoio do* **Centro Nacional de Supercomputação - UFRGS**

Índice

Lista de Figuras iii

Lista de Tabelas vii

Resumo viii

Abstract ix

1 Introdução 1

2 O Método Numérico e o Cálculo Autoconsistente 10
- 2.1 Solução da Equação de Schrödinger . . . 10
  - 2.1.1 Evolução da Função de Onda em Tempo Real . . . 11
  - 2.1.2 Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário . . . 16
- 2.2 Sistemas Unidimensionais . . . 18
  - 2.2.1 O Cálculo Autoconsistente . . . 19
- 2.3 Solução da Equação de Schrödinger: Propagação em Duas Dimensões . . . 21
  - 2.3.1 Método da Transformada de Fourier . . . 22
- 2.4 Solução da Equação de Poisson . . . 25
  - 2.4.1 Condições de Contorno para a Equação de Poisson . . . 27

3 Fios Quânticos do tipo "V-Groove " 30
- 3.1 Sistemas Quase-1D Corrugados . . . 30
- 3.2 Modelo Teórico . . . 37
- 3.3 Efeitos da Densidade de Impurezas Doadoras . . . 40
- 3.4 Efeitos do "Spacer " . . . 48
- 3.5 Efeitos da Temperatura . . . 53
- 3.6 Conclusões . . . 57

4 Fios Quânticos por Confinamento Eletrostático 58
- 4.1 Introdução . . . 58
- 4.2 Sistema Investigado . . . 60
- 4.3 Estados Eletrônicos para $T = 0$ K . . . 68
  - 4.3.1 Estudo do Confinamento para $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3} . . . 68
  - 4.3.2 Estudo do Confinamento para $N_d = 4.5 \times 10^{18}$ cm^{-3} . . . 72
- 4.4 Transição de um Sistema Quase-2D para um Quase-1D . . . 75

4.5 Cálculo da Condutância e da Capacitância 91
4.6 Conclusões 96

5 Conclusão **97**

Apêndices **99**

A Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário **99**

B Simulação Semi-Clássica de Difusão e Deriva **103**
B.1 Equação de Poisson 103
B.2 Equações de Continuidade das Correntes 103
B.3 Equações das Densidades de Correntes 104

Lista de Figuras

2.1 Discretização da rede 15
2.2 Condições de contorno para o potencial 27
2.3 Representação esquemática do perfil de potencial de uma heteroestrutura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. 29

3.1 Canais de diferentes formas geométricas obtidos por diferentes processos de corrosão química. 31
3.2 Super-rede de poços quânticos. 32
3.3 Corte secional da estrutura $n - Al_xGa_{1-x}As/u - GaAs$, mostrando uma interface que apresenta um perfil de potencial periódico do tipo dentes de uma serra. A região *(A)* é região côncava do $GaAs$ e a região *(B)* é a região convexa do $GaAs$. 34
3.4 Potencial obtido por Sawada et al. [1] e usado por Vacek et al. [2] para calcular os níveis de energia deste sistema. 34
3.5 Diagramas de energia calculados nos pontos A (□) (região côncava do $GaAs$) e B (•) (região convexa do $GaAs$). 36
3.6 (a) Densidade de probabilidade do estado fundamental. (b) curvas de nível da densidade de probabilidade do estado fundamental. Resultado de Vacek et al. [2]. 36
3.7 Representação esquemática da heteroestrutura $n - Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ corrugada com dopagem modulada, e com um *gate* aplicado ao topo da heteroestrutura. 38
3.8 Representação esquemática da formação do gás de elétrons quase-bidimensional, na interface da heteroestrutura n-$Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, com as respectivas condições de contorno usadas em sua simulação. 39
3.9 Representação esquemática do potencial autoconsistente de uma heteroestrutura $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As/\,GaAs$ com interface corrugada de dopagem modulada. 39
3.10 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 42
3.11 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 42
3.12 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 43
3.13 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 43

3.14 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 44
3.15 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 44
3.16 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 45
3.17 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.01 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 45
3.18 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 46
3.19 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 46
3.20 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.5 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 47
3.21 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.5 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 47
3.22 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 50
3.23 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 50
3.24 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 51
3.25 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 51
3.26 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 52
3.27 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 52
3.28 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 4$, e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 55
3.29 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 4 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 55
3.30 Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 4$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 56
3.31 Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 4 K e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}. 56

4.1 Diferentes configurações de "*gate*" que são usadas para impor gradientes de potencial lateral a um 2DEG [3]. 61
4.2 Seções transversais de heterojunções de $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ obtidas através de processos de corrosão (*etching*) [3]. 61
4.3 Representação de fios quânticos cujo o confinamento em umas das direções é devido a um potencial eletrostático. 62
4.4 Perfil do potencial de fios quânticos cujo o confinamento em umas das direções é devido a um potencial eletrostático. 63

4.5 Perfil do potencial da heteroestrutura de $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$, em um corte transversal paralelo a direção de crescimento da amostra. (a) Aqui mostramos a heteroestrutura com a estrutura de *gate*, e em (b) mostramos o perfil do potencial em uma região sob o *gate* e em uma sem o *gate*. 63
4.6 Visão do topo do dispositivo utilizado por Okada et al [4] para investigar a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D. 65
4.7 Seção transversal do dispositivo investigado por Okada et al. 65
4.8 Trancondutância versus voltagem aplicada ao gate. Resultado experimental obtido por Okada et al. [4] 66
4.9 Transcondutância versus voltagem aplicada ao gate, e a derivada segunda da corrente de dreno versus voltagem aplicada ao gate. Resultados experimentais obtidos por Okada et al. [4] 67
4.10 Capacitância versus voltagem aplicada ao gate. Resultado experimental obtido por Okada et al. [4] 67
4.11 Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 300$ mV. 70
4.12 Relação de dispersão para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $V_g = 300$ meV. 70
4.13 Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 600$ mV. 71
4.14 Relação de dispersão para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $V_g = 600$ meV. 71
4.15 Relação de dispersão para duas diferentes voltagens aplicadas ao gate. . . . 73
4.16 Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 300$ mV 74
4.17 Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 600$ mV 74
4.18 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 0.0$ mv. 78
4.19 Relação de dispersão para $V_g = 0.0$ mv. 78
4.20 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 100$ mv. 79
4.21 Relação de dispersão para $V_g = 100$ mv. 79
4.22 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 100$ mV. . 80
4.23 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 100$ mV. 80
4.24 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 200$ mv. 81
4.25 Relação de dispersão para $V_g = 200$ mv. 81
4.26 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 200$ mV. . 82
4.27 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 200$ mV. 82
4.28 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 300$ mv. 83
4.29 Relação de dispersão para $V_g = 300$ mv. 83
4.30 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 300$ mV. . 84
4.31 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 300$ mV. 84
4.32 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 400$ mv. 85
4.33 Relação de dispersão para $V_g = 400$ mv. 85

4.34 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 400$ mV. . 86
4.35 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 400$ mV. 86
4.36 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 500$ mv. 87
4.37 Relação de dispersão para $V_g = 500$ mv. 87
4.38 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 500$ mV. . 88
4.39 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 500$ mV. 88
4.40 Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 600$ mv. 89
4.41 Relação de dispersão para $V_g = 600$ mv. 89
4.42 Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 600$ mV. . 90
4.43 Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 600$ mV. 90
4.44 Condutância versus voltagem para uma temperatura de 4.0 K. 93
4.45 Logaritmo da condutância versus voltagem para uma temperatura de 4.0 K. 93
4.46 (a) Aqui temos a população total do sistema em função da voltagem aplicada aos *gates*. (b) Temos a capacitância versus voltagem aplicada aos *gates*. 95

Lista de Tabelas

3.1 Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura zero e um *spacer* de 0 Å. 41
3.2 Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura zero e um *spacer* de 50 Å. 49
3.3 Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura 4 K e um *spacer* de 0 Å. 54

4.1 Energias e população dos quatro primeiros níveis de energia em $k_x = 0$, para uma temperatura 4 K e um *spacer* de 50 Å. 75

Resumo

Estudamos as propriedades eletrônicas de dois sistemas quase-unidimensionais distintos, resolvendo autoconsistentemente as equações de Schrödinger e Poisson. O método usado para calcular a estrutura eletrônica deste sistema é baseada na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo usando a técnica do *Split-Operator*. No primeiro sistema estudamos os efeitos da corrugação periódica da interface da estrutura $n - Al_xGa_{1-x}As$ / $GaAs$ na densidade eletrônica ao longo desta interface. A forma geométrica desta interface é do tipo dente de serra. Nas camadas de inversão convencionais, os elétrons estão distribuídos uniformemente ao longo da interface plana da heteroestrutura, mas devido a forma dente de serra desta estrutura, os elétrons se distribuem de maneira não uniforme ao longo da interface, produzindo um gás de elétrons quase-unidimensional. A estrutura que investigamos possui um período de 806 Å e uma densidade residual uniforme de impurezas aceitadoras da ordem de 10^{15} cm^{-3}. Calculamos a estrutura eletrônica do gás de elétrons unidimensional confinado na interface corrugada em função da voltagem aplicada ao *gate*, da densidade de impurezas doadoras e da temperatura. Os resultados obtidos para a densidade eletrônica mostram que, dependendo da densidade de impurezas doadoras, haverá a formação de um gás de elétrons quase-unidimensional nos vértices da estrutura dente de serra. O segundo sistema que estudamos é constituído por um gás de elétrons bidimensional, formado na interface de uma camada de $Al_{1-x}Ga_xAs$ com uma camada de $GaAs$, sobre a qual, temos uma estrutura periódica de "*gates*". Aplicando-se uma voltagem negativa sobre os "*gates*" teremos a formação de fios quânticos nas regiões entre os "*gates*". Neste sistema observamos a transição de um sistema quase-bidimensional para um quase-unidimensional. Investigamos suas propriedades eletrônicas em função da temperatura, da voltagem aplicada aos "*gates*" e da densidade de impurezas doadoras.

Abstract

We have studied the electronic properties of two different quasi-one-dimensional systems solving self-consistently the Schrödinger and Poisson equation. The method we use to calculate the electronic levels is based on the solution of the time-dependent Schrödinger equation using the split-operator technique. In the first system we have studied, we present a theoretical calculation of the electronic structure of v-groove quantum wires confined in modulation-doped n-$AlGaAs/GaAs$. The system investigated is saw-tooth corrugated by bendings with period of 850 Å. Results of the electronic structure are obtained as a function of the gate voltage and the donor impurity density. The electronic density shows the existence of a quasi one-dimensional electron gas. The second system studied here is composed by a two-dimensional electron gas confined at the interface of an $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$ heterostructure, on top of which there is a periodic structure of gates. When a negative voltage is applied to the gates, the regions at the interface beneath them are depleted and quantum wires are formed. We have calculated the electronic structure of subband of that system. We investigated the electronic properties of the quantum wires as a function of gate voltage, from which we determine the threshold between the 2D and 1D transitions, the temperature and the ionized donor density.

Capítulo 1

Introdução

Ao considerarmos o movimento de elétrons na matéria condensada, estamos tratando de descrever o problema do movimento de um grande número de elétrons e núcleos (cerca de 10^{23} partículas por cm^3) obedecendo as leis da mecânica quântica. Devido ao grande número de partículas e a complexidade das interações envolvidas, um tratamento preciso e completo destes sistemas, torna-se impraticável. É necessário então, desenvolver modelos aproximados com o objetivo de resolver o problema. O tipo de aproximação utilizada depende do problema específico a ser estudado e das propriedades nas quais estamos interessados. Então, para se elaborar um modelo teórico que descreva razoavelmente bem o sistema a ser estudado, devemos utilizar os resultados experimentais para ajustá-lo. Desta forma, torna-se muito importante termos conhecimento dos trabalhos experimentais que estão sendo desenvolvidos no sistema que nos interessa, e de seus resultados, os quais terão um papel indispensável no progresso das hipóteses, nas quais baseamos o modelo. As propriedades observadas nos sólidos podem ser explicadas baseadas em uma descrição cuja a implementação requer a incorporação de um Hamiltoniano bastante realístico (que descreva bem os termos de interação relevantes para as propriedades que se deseja observar) apropriado para as interações eletrostáticas e eletromagnéticas entre as partículas. O desenvolvimento da maioria dos trabalhos realizados atualmente, surge de uma interação estreita entre a física teórica e a física experimental.

O estudo teórico de um sistema com um grande número de partículas interagindo objetiva-se não apenas em tentar estimar o estado fundamental do sistema, mas também, em calcular os estados excitados cujas energias diferem pouco do estado fundamental. Os trabalhos experimentais estão associados à resposta do sistema a um estímulo externo. Tais experiências modificam o estado do sistema para um estado de maior energia. Como grande número das propriedades do sistema surgem dessa mudança de estado, então para analisarmos os resultados experimentais é importante que conheçamos estes estados.

Nos últimos anos temos testemunhado um extensivo desenvolvimento dos métodos teóricos e computacionais de cálculo da estrutura eletrônica e propriedades da matéria condensada. Há evidentemente dois fatores que contribuíram de forma mais relevante para este desenvolvimento. O primeiro deve-se ao uso mais intenso da teoria do funcional da densidade, que torna possível a partir de uma unificação conceitual básica descrever os estados eletrônicos em várias espécies de matéria, e o segundo deve-se ao progresso no campo da física computacional que tornou possível uma análise quantitativa das propriedades físicas dos sistemas complexos.

Para se calcular a estrutura eletrônica de sólidos um dos métodos mais importante é o cálculo autoconsistente, isto é, a obtenção do potencial efetivo autoconsistente usando a teoria do funcional da densidade. Isto ocorre porque há um grau de incerteza na formulação do potencial efetivo nos cálculos sem autoconsistência. O problema é que na teoria do funcional da densidade o processo de obtenção do potencial em uma análise final reduz-se ao cálculo da densidade eletrônica, na qual, ela é expressa através das funções de onda atômicas ou iônicas.

Os cálculos autoconsistentes da estrutura eletrônica de sólidos, que usam o formalismo da teoria do funcional densidade, são os mais usados e os que apresentam os melhores resultados. Este tipo de cálculo se caracteriza pelo fato de que o potencial efetivo resultante é obtido através da densidade eletrônica, a qual é expressa em termos

das funções de onda iônicas e atômicas. Devido a esta característica é muito importante obtermos as funções de onda de uma maneira bastante precisa. O maior esforço dos cálculos autoconsistentes se concentram na obtenção da estrutura eletrônica, portanto, o método teórico empregado para este propósito deverá ser bastante eficiente, ou seja, deverá minimizar o esforço computacional enquanto mantém uma boa precisão, já que as funções de onda participam diretamente do processo autoconsistente.

Os sistemas eletrônicos quase-unidimensionais (gás de elétrons quase-unidimensional) 1DEG nos últimos anos têm sido alvo de intensas investigações, tanto teóricas quanto experimentais, devido ao seu grande potencial tecnológico. Experimentalmente com o atual estado da arte, pode-se confinar os portadores (elétrons e buracos) espacialmente em estruturas semicondutoras em uma (poços quânticos), duas (fios quânticos) e três dimensões (pontos quânticos ou "*quantum dots*") com um controle da ordem de uma monocamada atômica. Toda tecnologia de fabricação destas estruturas semicondutoras se deve aos avanços das técnicas de crescimento de cristais [3, 5–12] tais como: *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) e *Metalorganic Chemical Vapor Deposition* (MOCVD), com as quais pode-se construir estruturas semicondutoras compostas por camadas ultra-finas (da ordem de 20 Å) geralmente constituídas por elementos do grupo III-V ou II-VI. Com a utilização de materiais semicondutores de diferentes *gaps* entre as bandas de valência e condução, é possível construir seqüências de barreiras de potenciais e poços quânticos. Para aqueles semicondutores cujos parâmetros de rede são muito próximos, como é para o $GaAs$ e o $AlGaAs$, é possível construir amostras com interfaces abruptas cuja a forma do potencial resultante pode ser descrita por uma sucessão de barreiras e de poços quadrados. A dopagem destas estruturas com impurezas aceitadoras e/ou doadoras de forma controlada nos possibilita obter os mais variados perfis de potencial na direção de crescimento.

O crescimento de heteroestruturas semicondutoras combinado com as técnicas

de nanolitografia e com o *"etching"* químico (corrosão química) tem propiciado a possibilidade de realizarmos um confinamento em duas (fios quânticos) ou até três dimensões (pontos quânticos ou "*quantum dots*") nas mais variadas formas geométricas. Geralmente, as dimensões envolvidas nestes sistemas são comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie dos elétrons, revelando assim a natureza quântica dos portadores presente nesses sistemas. Devido ao confinamento nestas dimensões, os portadores apresentam estados discretos e exibem propriedades elétricas não usuais. O entendimento do comportamento dos portadores confinados nestas regiões muito pequenas é de grande interesse devido ao seu grande potencial de aplicação tecnológica.

Os efeitos quânticos, devido ao tamanho das dimensões envolvidas, que surgem em dispositivos semicondutores, dependem da forma do potencial de confinamento e de suas dimensões laterais. Diferentemente do caso mais conhecido, o poço quântico retangular bidimensional, os poços quânticos unidimensionais e zero-dimensionais (quase-1D e quase-0D respectivamente) de diferentes formas podem ser obtidos dependendo da técnica de fabricação. Portanto, a tecnologia de fabricação tem um papel crucial na determinação do fenômeno de quantização que se deseja.

A redução do tamanho da geometria dos dispositivos eletrônicos é o meio mais efetivo de aumentarmos a velocidade de operação e a densidade de empacotamento dos circuitos integrados. A atual tecnologia de nanofabricação é capaz de definir estruturas com dimensões mais estreitas do que escalas de comprimento de processos físicos pertinentes. Neste regime temos uma mistura de transporte clássico e quântico. Investigar as propriedades eletrônicas de dispositivos ultrapequenos pode indicar o tamanho limite dos dispositivos convencionais e pode conduzir a futuros dispositivos eletrônicos que explorem os efeito quânticos que surgem devido as pequenas geometrias. Os sistemas de maior interesse atualmente são os quase-1D (fios quânticos) e os quase-0D (pontos quânticos). Nestes sistemas as energias do elétron é quantizada nas direções do confinamento produzin-

do uma mudança dramática nas suas propriedades físicas. A quantização em sistemas quase-1D foi verificada em experimentos através de medidas de capacitância [4, 13–15], condutância [16–18], magnetocondutância [19–22] e propriedades ópticas [6, 23–30].

Por exemplo, é esperado que fios quânticos semicondutores exibam características ópticas únicas devido ao confinamento quântico dos seus portadores de carga quase-unidimensionais [3, 6, 8, 9, 23, 27, 28, 30–34] . Estas características incluem uma absorção aguda, um espectro de ganho e de reflação, aumento na energia de ligação de excitons e impurezas e um acoplamento elétron-fônon modificado. Tais propriedades tornam os fios quânticos atrativos para aplicação em novos dispositivos opto-eletrônicos, pois estes oferecem perspectivas de novas funcionalidades e de aperfeiçoamento da performance de certas características de outros tipos de dispositivos. Maiores ganhos ópticos e um perfil espectral de ganho estreito devem ser particularmente úteis em lasers de fios quânticos mostrando uma corrente limiar extremamente baixa, uma reduzida sensibilidade a temperatura, uma alta velocidade de modulação e um espectro de larguras de linha estreito. Espectro de absorção e refração agudos podem ser empregados em moduladores ópticos e chaves de baixa voltagem, assim como, em foto-detectores de alta velocidade.

Portanto, as heteroestruturas de fios quânticos habilitadas para tais aplicações opto-eletrônicas devem reunir um certo número de qualidades estruturais. A formação de sub-bandas quase-1D distintas no espectro de energia, requer que o poço de potencial que define os fios seja o suficientemente estreito e uniforme, para produzir uma separação entre as sub-bandas tais que $\Delta E > K_B T$, e flutuações δE na sub-bandas de energia devido aos defeitos da interface (a não uniformidade do poço de potencial) as quais $\delta E \ll \Delta E$. Além disso, o nível de Fermi E_f deve ser o suficientemente baixo para evitar que os estados excitados do fio quântico sejam populados. Enquanto as restrições acima devem ser mantidas para quaisquer intenções de se produzir estruturas de baixa dimensionalidade, existem vínculos adicionais impostos aos fios quânticos aceitáveis para aplicações opto-

eletrônicas. Primeiro, as interfaces de fios quânticos não podem ter defeitos, pois estes poderiam minimizar os efeitos das recombinações não radiativas na interface, os quais reduzem a eficiência quântica e o tempo de vida dos portadores. Para alcançarmos este objetivo, as técnicas de fabricação nas quais os fios são formados completamente in situ durante o crescimento epitaxial são muito atraentes. Segundo, para assegurarmos uma interação adequada entre os portadores confinados e os feixes ópticos, deseja-se um arranjo uniforme e de alta densidade de fios quânticos. E terceiro, um mecanismo eficiente de captura dos portadores em torno da barreira para o poço de potencial do fio quântico é essencial para utilizarmos eficientemente os portadores em excesso. Considerações similares também se aplicam ao caso de heteroestruturas de pontos quânticos, quase-0D.

Estas estruturas nos possibilitam então investigar a Física em sistemas com dimensões reduzidas da ordem de dezenas de angstrons. Para entendermos o comportamento dos portadores (elétrons e buracos) confinados nestas estruturas e para podermos avaliar a viabilidade tecnológica das mesmas devemos resolver um problema de muitos corpos; cerca de 10^{23} partículas por cm^3.

Como vimos anteriormente os sistemas quase-unidimensionais para aplicação em dispositivos opto-eletrônicos devem reunir uma série de características e para avaliarmos estas devemos responder questões tais como: Qual é o espaçamento energético das sub-bandas quase-1D? Quantos estados estão populados? Quão confinado está o sistema? etc.. Fornecer uma resposta teórica a estas questões é em geral um problema bastante complicado. Devido a isto, torna-se necessário resolvermos as equações de Schrödinger e Poisson autoconsistentemente em duas dimensões. D. Jovanovic et al. [35] investigaram a ocorrência do espalhamento ressonante intersub-banda de fônons ópticos em um arranjo de fios quânticos em altas temperaturas. Para entender os resultados experimentais obtidos por Ismail, D. Jovanovic et al. [35] fizeram um cálculo autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson e posteriormente, um cálculo de Monte Carlo do espalhamento

eletrônicas. Primeiro, as interfaces de fios quânticos não podem ter defeitos, pois estes poderiam minimizar os efeitos das recombinações não radiativas na interface, os quais reduzem a eficiência quântica e o tempo de vida dos portadores. Para alcançarmos este objetivo, as técnicas de fabricação nas quais os fios são formados completamente in situ durante o crescimento epitaxial são muito atraentes. Segundo, para assegurarmos uma interação adequada entre os portadores confinados e os feixes ópticos, deseja-se um arranjo uniforme e de alta densidade de fios quânticos. E terceiro, um mecanismo eficiente de captura dos portadores em torno da barreira para o poço de potencial do fio quântico é essencial para utilizarmos eficientemente os portadores em excesso. Considerações similares também se aplicam ao caso de heteroestruturas de pontos quânticos, quase-0D.

Estas estruturas nos possibilitam então investigar a Física em sistemas com dimensões reduzidas da ordem de dezenas de angstrons. Para entendermos o comportamento dos portadores (elétrons e buracos) confinados nestas estruturas e para podermos avaliar a viabilidade tecnológica das mesmas devemos resolver um problema de muitos corpos; cerca de 10^{23} partículas por cm^3.

Como vimos anteriormente os sistemas quase-unidimensionais para aplicação em dispositivos opto-eletrônicos devem reunir uma série de características e para avaliarmos estas devemos responder questões tais como: Qual é o espaçamento energético das sub-bandas quase-1D? Quantos estados estão populados? Quão confinado está o sistema? etc.. Fornecer uma resposta teórica a estas questões é em geral um problema bastante complicado. Devido a isto, torna-se necessário resolvermos as equações de Schrödinger e Poisson autoconsistentemente em duas dimensões. D. Jovanovic et al. [35] investigaram a ocorrência do espalhamento ressonante intersub-banda de fônons ópticos em um arranjo de fios quânticos em altas temperaturas. Para entender os resultados experimentais obtidos por Ismail, D. Jovanovic et al. [35] fizeram um cálculo autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson e posteriormente, um cálculo de Monte Carlo do espalhamento

intersub-banda e encontraram um forte acoplamento ressonante entre as sub-bandas e os fônons polares ópticos na voltagem do *gate* indicada pelos dados experimentais. Cálculos de propriedades eletrônicas, com aproximações de diversas natureza, têm sido feitos nos mais variados sistemas quase-unidimensionais [33–65].

O objetivo deste trabalho consiste no cálculo autoconsistente dos estados eletrônicos de sistemas quase-unidimensionais 1DEG (gás de elétrons quase-unidimensional) [34, 35, 37, 41–51, 53–58, 60–65]. Para resolvermos a equação de Schrödinger utilizamos a técnica do *Split-Operator*, a qual recentemente foi adaptada com sucesso da física atômica [66–69] para a física da matéria condensada por Degani [70–73] para cálculos de estrutura eletrônica. Com esta técnica essencialmente, podemos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo possibilitando o estudo de propriedades dinâmicas de diversos sistemas. Para resolvermos a equação de Poisson bidimensional geralmente usa-se um algoritmo numérico iterativo [74–78], o que não é conveniente numericamente (esforço computacional) em um cálculo autoconsistente. Para contornarmos esta dificuldade, restringimos os sistemas estudados à aqueles que possam ser descritos, em ao menos uma das dimensões, por condições de contorno periódicas. Ao fazermos esta restrição, a solução numérica da equação de Poisson se limita a transformadas de Fourier e a inversões de uma matriz tridiagonal. Na solução numérica de todo o processo autoconsistente que utilizamos, a parte que exige um maior esforço computacional é aquela que faz uso dos algoritmos da "*Fast Fourier Transform*" e da inversão de uma matriz tridiagonal complexa.

Para termos uma idéia da grande variedade de problemas onde podemos aplicar este algoritmo nós o utilizamos no cálculo das propriedades eletrônicas de dois sistemas de grande interesse por parte dos pesquisadores, cuja a natureza do confinamento dos portadores é bastante distinta, e que possuem um grande número de parâmetros a serem investigados e que têm algum interesse tecnológico. Como os sistemas que iremos estudar

são fios quânticos, então um cálculo autoconsistente destas estruturas é importante porque ele nos fornece uma função de onda mais precisa, o que vem a ser muito importante nos cálculos de propriedades ópticas (vide por exemplo [35]).

Recentemente um novo método de preparação de fios quânticos foi proposto, e este consiste basicamente do crescimento epitaxial de poços quânticos diretamente em substratos padronizados não planares. O mecanismo básico é que o crescimento epitaxial em semicondutores III-V ocorre preferencialmente nas superfícies vicinais em vez da direção (100). Para obtermos fios quânticos, o crescimento epitaxial de poços quânticos de $GaAs/AlGaAs$ deverá ser feito em um substrato de $GaAs$, no qual, o padrão dos canais tenha sido obtido através de uma corrosão química. Uma grande variedade de estruturas podem ser obtidas hoje devido ao desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial, litografia e da corrosão química.

No capítulo 2, apresentaremos o método numérico utilizado para calcular a equação de Schrödinger e as aproximações envolvidas. Mostramos como é realizada numericamente a solução da equação de Poisson e como são impostas as condições de contorno.

No capítulo 3, iremos estudar as propriedades eletrônicas de fios quânticos do tipo *v-groove*, usando o método apresentado no capítulo 2. Recentemente este tipo de sistema tem sido bastante investigado tanto experimentalmente [7, 10–12, 79–82], quanto teoricamente [1, 2, 28, 34, 47, 48, 55, 83–86]. Investigamos os efeitos da temperatura, da densidade de impurezas doadoras e do "*spacer* " (uma estreita camada não dopada, tipicamente da ordem de 100 Å, a qual separa espacialmente os portadores da região de impurezas ionizadas, evitando assim a presença de centros espalhadores) nas propriedades eletrônicas dos fios quânticos, onde verificamos que a densidade de impurezas doadoras é o parâmetro mais relevante para as propriedades eletrônicas do sistema estudado.

No capítulo 4 estudamos uma estrutura que é constituída por uma super-rede de fios quânticos em heterojunções de $GaAs$-$Al_{1-x}Ga_xAs$. Esta heterojunção é formada por

uma camada de $GaAs$, seguida de uma de $Al_{1-x}Ga_xAs$ (o "*spacer* "), e posteriormente seguida por uma camada de n-$Al_{1-x}Ga_xAs$ dopada com impurezas doadoras. Os elétrons das impurezas doadoras migram para a interface do $GaAs$ com o $Al_{1-x}Ga_xAs$ não dopado formando um gás de elétrons bidimensional. Com a formação do gás de elétrons bidimensional na interface do $GaAs$ com o $Al_{1-x}Ga_xAs$, pode-se criar fios quânticos nesta interface por meio de um potencial eletrostático aplicado aos "*gates*". Aplicando-se uma voltagem negativa aos "*gates* " os elétrons procuram regiões de menor energia ficando confinados nas regiões entre os "*gates*", formando nesta região um gás de elétrons que dependendo da voltagem pode ser unidimensional (um canal eletrônico), ou seja, um fio quântico.

Calculamos a estrutura de sub-bandas eletrônicas para este sistema em função da voltagem aplicada ao *gate* e da temperatura. Também observamos, que o gás de elétrons sofre uma transição de um sistema quase-bidimensional para um quase-unidimensional em função da voltagem aplicada. Esta transição foi observada experimentalmente por Smith et al. [13] em 1987 e por Okada et al. [4] em 1988, através de medidas de capacitância e de transcondutância.

No capítulo 5, apresentamos as conclusões e propostas trabalhos futuros, dando prosseguimento ao trabalho iniciado aqui.

Capítulo 2

O Método Numérico e o Cálculo Autoconsistente

Neste capítulo apresentaremos o algoritmo autoconsistente usado para calcular as propriedades eletrônicas dos sistemas quase-unidimensionais estudados neste trabalho. Devido a uma limitação computacional (tempo de CPU) provenientes da solução da equação de Poisson, o algoritmo que usamos está restrito a sistemas os quais, em ao menos uma das dimensões, as condições de contorno sejam periódicas. Os métodos numéricos utilizados para se resolver a equação de Poisson [74,75] em duas dimensões com condições de contorno finitas em ambas as direções são iterativos, o que requer um esforço muito grande. O fato do sistema ser periódico em uma das direções possibilita-nos utilizar o algoritmo da *Fast Fourier Transform* [87] nos cálculos, otimizando o tempo computacional mas, por um outro lado, precisamos usar uma malha com uma discretização uniforme. Já os sistemas bidimensionais com condições de contorno periódicas em ambas as direções não oferecem dificuldades do ponto de vista numérico, e a princípio convergem rapidamente.

2.1 Solução da Equação de Schrödinger

Agora iremos discutir o método do *Split-Operator*, o qual foi utilizado para resolvermos a equação de Schrödinger. Este método inicialmente usado em dinâmica molecular [66–69] foi adaptado para o uso em física da matéria condensada [70], onde tem

sido aplicado com sucesso [65, 70–73, 88, 89]. Ele nos possibilita estudar a evolução temporal das funções de onda de um dado sistema. Foram obtidos excelentes resultados ao se aplicar este método no estudo de sistemas bidimensionais [70–72, 88, 89], na presença de campos elétricos e magnéticos [88, 89], assim como o estudo em tempo real do tempo de tunelamento em um poço quântico duplo assimétrico [89]. Devido ao sucesso obtido no estudo de sistemas bidimensionais, aos recursos computacionais disponíveis e aos poucos resultados teóricos interessantes na literatura, procuramos adaptar este método para resolvermos problemas unidimensionais.

Inicialmente será mostrado como calcular a propagação da função de onda no domínio de tempo real. Posteriormente, mostraremos que as autofunções de um Hamiltoniano H são obtidas ao fazermos uma evolução temporal de uma função de onda inicial, na qual trocamos t por $-i\tau$, isto é, fazendo a propagação das funções de onda no domínio de tempo imaginário. Mostraremos que com este procedimento a função de onda evolui para o estado fundamental do sistema, e os estados excitados são obtidos impondo-se a ortogonalidade entre estes estados.

2.1.1 Evolução da Função de Onda em Tempo Real

A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = H\Psi(\mathbf{x},t) \tag{2.1}$$

onde,

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \tag{2.2}$$

tem formalmente a seguinte solução

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H dt\right)\Psi(\mathbf{x},0),$$

de onde se obtém que

$$\Psi(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t} H dt\right)\Psi(\mathbf{x},t), \tag{2.3}$$

Como o Hamiltoniano não depende do tempo, então podemos reescrever a equação acima como

$$\Psi(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)\Psi(\mathbf{x},t), \tag{2.4}$$

usando a equação (2.2) , a equação (2.4) pode ser escrita na seguinte forma

$$\Psi(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\left(\frac{V(\mathbf{x})}{2}+\frac{\mathbf{P}^2}{2m}+\frac{V(\mathbf{x})}{2}\right)\right]\Psi(\mathbf{x},t). \tag{2.5}$$

Com o auxílio da identidade $e^{A+B+A} = e^A e^B e^A$, que é válida para dois operadores A e B que satisfaçam as relações de comutação $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$, a equação (2.5) toma a forma

$$\Psi(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(\mathbf{x})\Delta t}{2\hbar}\right]\exp\left[-\frac{i\mathbf{P}^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\exp\left[-\frac{iV(\mathbf{x})\Delta t}{2\hbar}\right]\Psi(\mathbf{x},t). \tag{2.6}$$

Para que as relações de comutação sejam satisfeitas, isto é,

$$\left(\frac{i\Delta t}{2\hbar}\right)^3\left[V(\mathbf{x}),\left[\frac{\mathbf{P}^2}{m},V(\mathbf{x})\right]\right] = 0; \tag{2.7}$$

$$\left(\frac{i\Delta t}{2\hbar}\right)^3\left[\frac{\mathbf{P}^2}{m},\left[\frac{\mathbf{P}^2}{m},V(\mathbf{x})\right]\right] = 0. \tag{2.8}$$

termos da ordem de $(\Delta t)^3$ devem ser desprezados introduzindo assim um erro na equação (2.6) devido à não comutatividade dos operadores energia cinética e potencial. É importante notar que todos os três operadores que aparecem na equação (2.6) são unitários, logo, a norma da função de onda é conservada nesta operação.

Para se obter a evolução temporal da função de onda, a equação (2.6) deve ser resolvida. Numericamente isto é feito discretizando o espaço em uma rede, podendo esta ser não uniforme. Assim, pode se discretizar o espaço de forma a considerar uma distância maior entre pontos adjacentes, onde a função de onda varia mais suavemente. A seguir a função de onda inicial e o potencial $V(\mathbf{x})$ são calculados em cada ponto desta rede. O uso de uma rede não uniforme é apropriado para sistemas muito grandes, onde um grande número de pontos levaria a um maior tempo de computação.

Inicialmente, multiplica-se $exp[-\frac{iV(\mathbf{x})\Delta t}{2\hbar}]$ pela função de onda inicial $\Psi(\mathbf{x},t)$:

$$\xi(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(\mathbf{x})\Delta t}{2\hbar}\right]\Psi(\mathbf{x},t). \tag{2.9}$$

Em seguida, o operador contendo a energia cinética deve ser aplicado ao resultado obtido:

$$\eta(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{i\mathbf{P}^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\xi(\mathbf{x},t+\Delta t). \tag{2.10}$$

Para que esta operação possa ser efetuada, devemos decompor o operador contendo a energia cinética nas suas três componentes $\left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m}=\frac{P_x^2}{2m}+\frac{P_y^2}{2m}+\frac{P_z^2}{2m}\right)$. Como as componentes do operador energia cinética comutam entre si, podemos reescrever a equação anterior como:

$$\eta(\mathbf{x},t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iP_x^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\exp\left[-\frac{iP_y^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\exp\left[-\frac{iP_z^2\Delta t}{2m\hbar}\right]\xi(\mathbf{x},t+\Delta t).$$

Agora devemos aplicar uma componente de cada vez, e para cada componente o operador energia cinética é escrito como $\kappa_i = i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ assim:

$$\begin{aligned}
\exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{P_i^2}{2m}\right) &= \exp\left(i\frac{\hbar\Delta t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right) = \exp\left(\kappa_i\Delta t\right) \\
&= 1 + \kappa_i\Delta t + \frac{(\kappa_i\Delta t)^2}{2!} + \frac{(\kappa_i\Delta t)^3}{3!} + \cdots \\
&= 1 + \frac{\kappa_i\Delta t}{2} + \frac{\kappa_i\Delta t}{2} + \frac{(\kappa_i\Delta t)^2}{4} + \frac{(\kappa_i\Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3) \\
&= \left(1 + \frac{\kappa_i\Delta t}{2}\right)\cdot\left(1 + \frac{\kappa_i\Delta t}{2} + \frac{(\kappa_i\Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3)\right) \\
&\approx \left(1 + \frac{\kappa_i\Delta t}{2}\right)\cdot\left(1 - \frac{\kappa_i\Delta t}{2}\right)^{-1},
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\exp\left(i\frac{\hbar\Delta t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right) \approx \left(1 + \frac{\kappa_i\Delta t}{2}\right)\cdot\left(1 - \frac{\kappa_i\Delta t}{2}\right)^{-1} \tag{2.12}$$

onde o erro cometido é da mesma ordem daquele da equação (2.6). Podemos observar ainda, que o operador do lado direito da equação (2.11) permanece unitário. A equação (2.10) pode ser escrita na forma:

$$\left(1 - i\frac{\hbar\Delta t}{4m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)\cdot\eta(\mathbf{x}, t+\Delta t) = \left(1 + i\frac{\hbar\Delta t}{4m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)\cdot\xi(\mathbf{x}, t+\Delta t) \tag{2.13}$$

Para resolver a equação (2.13) as derivadas em cada ponto da rede são calculadas usando-se a expressão (método das diferenças finitas):

$$f_i'' = \frac{2f_{i-1}}{\Delta_{i-1}(\Delta_{i-1}+\Delta_i)} - \frac{2f_i}{\Delta_{i-1}\Delta_i} + \frac{2f_{i+1}}{\Delta_i(\Delta_{i-1}+\Delta_i)} \tag{2.14}$$

onde o índice i indica um ponto da rede discretizada, f_i o valor da função f neste ponto e $\Delta_i = x_{i+1} - x_i$, conforme mostra a figura 2.1. Como é comum neste tipo de problema usamos as seguintes condições de contorno: $f_0 = f_{n+1} = 0$, $\Delta_0 = \Delta_1$ e $\Delta_n = \Delta_{n-1}$.

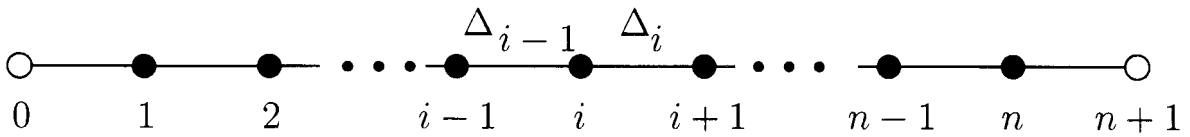


Figura 2.1: Discretização da rede

Substituindo a equação (2.14) na equação (2.13) e definindo $\epsilon = i\hbar\Delta t/2m$ obtém-se,

$$\frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}(\Delta_{i-1}+\Delta_i)}\eta_{i-1} - \left(1 + \frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}\Delta_i}\right)\eta_i + \frac{\epsilon}{\Delta_i(\Delta_{i-1}+\Delta_i)}\eta_{i+1} = \Theta_i \tag{2.15}$$

onde,

$$\Theta_i = -\frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}(\Delta_{i-1}+\Delta_i)}\xi_{i-1} - \left(1 - \frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}\Delta_i}\right)\xi_i - \frac{\epsilon}{\Delta_i(\Delta_{i-1}+\Delta_i)}\xi_{i+1} \tag{2.16}$$

Escrevendo a equação (2.15) na forma matricial:

$$\sum_j M_{i,j}\eta_j = \Theta_i, \tag{2.17}$$

ou seja,

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{54} & M_{55} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & M_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{n,n-1} & M_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \\ \eta_4 \\ \eta_5 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \\ \Theta_4 \\ \Theta_5 \\ \vdots \\ \Theta_n \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

onde a soma em (2.17) é feita sobre todos os pontos da rede e,

$$M_{ij} = \begin{cases} -\left(1 + \frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}\Delta_i}\right), & j = i \\ \frac{\epsilon}{\Delta_i(\Delta_{i-1} + \Delta_i)}, & j = i+1 \\ \frac{\epsilon}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i+1})}, & j = i-1 \\ 0, & \text{outros valores de j} \end{cases} \tag{2.19}$$

Logo, o problema foi transformado em um sistema linear cuja matriz associada é tridiagonal. A solução deste sistema é a inversa da matriz M, a qual nos dá os valores da função $\eta(\mathbf{x}, t+\Delta t)$ em cada ponto da rede. Este passo deverá ser repetido para cada componente x_i do operador energia cinética.

Finalmente, a função de onda no instante $t + \Delta t$ é obtida multiplicando-se em cada ponto da rede $\exp\left(-iV(\mathbf{x})\Delta t/2\hbar\right)$ por $\eta(\mathbf{x}, t + \Delta t)$, ou seja,

$$\Psi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{V(\mathbf{x})\Delta t}{2\hbar}\right)\eta(\mathbf{x}, t + \Delta t). \tag{2.20}$$

2.1.2 Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário

Aqui iremos apresentar um método para obtermos as autofunções e os autovalores de um Hamiltoniano H, o qual se baseia na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Os métodos convencionais para resolver este problema se baseiam na diagonalização da Hamiltoniana ou em soluções numéricas iterativas da equação de Schrödinger independente do tempo.

Ao repetirmos o procedimento descrito na seção anterior 2.1.1, mas trocando t por $-i\tau$, isto é, fazendo a propagação da função de onda no domínio de tempos imaginários, obtemos as autofunções do Hamiltoniano H. Pode-se mostrar (ver apêndice A) que ao fazermos a propagação de uma função de onda qualquer no domínio de tempos imaginários, ela irá evoluir para o estado fundamental do Hamiltoniano H. Os estados excitados são obtidos impondo-se a ortonormalidade entre as funções de onda. Utilizamos

o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt a cada evolução temporal como segue: considere um número de estados que se deseja encontrar. A seguir é feito uma evolução no tempo imaginário com incremento de tempo $\Delta t = -i\Delta\tau$ para cada função de onda. A função de onda resultante correspondente ao estado fundamental é então normalizada (ao contrário da propagação no tempo real, as funções de onda na propagação em tempos imaginários devem ser normalizadas a cada passo). Em seguida, aplica-se o método de Gram-Schmidt para a função de onda resultante correspondente ao primeiro estado excitado, ortogonalizando-a em relação ao estado fundamental e depois normalizando-a. As novas funções de onda são dadas por

$$|\Psi_i^{(new)}(\tau)\rangle = \frac{|\varphi_i^{(old)}(\tau)\rangle - \sum_{j<i}\langle\Psi_j^{(new)}(\tau)|\varphi_i^{(old)}(\tau)\rangle|\Psi_j^{(new)}(\tau)\rangle}{\sqrt{\langle\varphi_i^{(old)}(\tau)|\varphi_i^{(old)}(\tau)\rangle - \sum_{j<i}|\langle\Psi_j^{(new)}(\tau)|\varphi_i^{(old)}(\tau)\rangle|^2}}. \tag{2.21}$$

Esse processo é repetido em ordem crescente de energia para todos as autofunções. As funções de onda resultantes são novamente evoluídas de Δt, até que a convergência na energia seja alcançada.

O incremento de tempo Δt, deve ser escolhido pequeno o suficiente para assegurar uma precisão no cálculo das funções de onda. Para encontrarmos o melhor incremento de tempo Δt para cada caso, devemos fazer uma propagação da função de onda do sistema em tempos reais e observarmos a conservação da energia, via cálculo do valor esperado do Hamiltoniano H; se a energia está sendo conservada então este é um bom incremento de tempo, senão devemos diminuir o incremento de tempo até encontrarmos um que conserve a energia do sistema na propagação em tempos reais. Usando o princípio da incerteza, podemos fazer uma estimava do valor de Δt que devemos usar na propagação das funções de onda, da seguinte forma:

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar.$$

Aqui, devemos ter em mente que ΔE é um intervalo de energia que varia sobre todo o espectro de energia do sistema, ou seja,

$$\Delta E = \Delta V_{\max}$$

Para as ligas de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, esta diferença é tipicamente da ordem de $\Delta E \approx 2.000$ meV, desta forma,

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E} \approx \frac{658.2}{2.000} \approx 0.3 \quad fs.$$

Basicamente, as características mais importantes desse método de solução da equação de Schrödinger são:

1. *Boa estabilidade,*
2. *Depende muito pouco do "chute" inicial das funções de onda,*
3. *Pode-se estudar qualquer poço de potencial.*
4. *Possibilidade de se estudar transientes quando a propagação é feita no tempo real.*

2.2 Sistemas Unidimensionais

Nesta seção iremos aplicar o método descrito anteriormente à sistemas unidimensionais que possuam uma simetria translacional em uma direção, ou seja, sistemas que tenham condições de contorno periódicas em uma direção e finitas na outra direção. Estas condições de contorno são provenientes de uma limitação numérica da solução equação de Poisson, o que ficará mais evidente posteriormente.

2.2.1 O Cálculo Autoconsistente

A descrição de um sistema de muitos corpos é difícil, por isso, são necessárias algumas simplificações. Neste trabalho será usada a aproximação devido a Hartree, a qual considera a função de onda do sistema como o produto das funções de onda de um corpo. Nesta aproximação, as funções de onda satisfazem a equação de Schrödinger de um corpo na presença de um potencial efetivo, interpretado como um potencial médio devido a todas as outras partículas, que é obtido, resolvendo-se a equação de Poisson.

Outra aproximação usual que é feita quando se trata de portadores num semicondutor é a aproximação de massa efetiva. Como os elétrons (buracos) são encontrados quase que exclusivamente em níveis próximos ao ponto de mínimo (máximo) da banda de condução (valência), a relação de dispersão pode ser aproximada por uma função quadrática em k_z, que é semelhante a relação de dispersão para partículas livres. Desta forma, o potencial cristalino não é considerado, e os elétrons movem-se sob a ação do potencial das impurezas como se tivessem massas diferentes daquelas, caso eles estivessem livres. Efeitos de não parabolicidade são desprezados.

Para um potencial de confinamento nas direções (x, y), o movimento do elétron permanece livre na direção z e a sua função de onda pode ser escrita na seguinte forma

$$\Psi_{n,k_z}(\vec{r}) = \frac{\exp(ik_z z)}{\sqrt{L_z}} \phi_{n,k_z}(x, y), \tag{2.22}$$

onde k_z é o vetor de onda na direção z e L_z é o comprimento do fio. A energia do sistema é então dada por

$$E_{n,k_z} = \varepsilon_n(k_z) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \tag{2.23}$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron. As funções de onda $\phi_{n,k_z}(x, y)$ que descrevem os efeitos do potencial de confinamento e os respectivos autovalores $\varepsilon_n(k_z)$ são obtidas a

partir da solução da equação de Schrödinger bidimensional de um corpo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_{ef}(x,y)\right]\phi_{n,k_z}(x,y) = \varepsilon_n(k_z)\phi_{n,k_z}(x,y), \tag{2.24}$$

sendo o potencial efetivo $V_{ef}(x,y)$ a soma da energia potencial de confinamento $V_{ext}(x,y)$ (devido à estrutura GaAlAs-GaAs-GaAlAs) com a energia potencial de Hartree, a qual, descreve as interações entre elétrons e destes com as impurezas da amostra. Portanto, o potencial efetivo é dado por:

$$V_{ef}(x,y) = V_{ext}(x,y) + V_H(x,y). \tag{2.25}$$

O potencial de Hartree V_H é obtido resolvendo-se a equação de Poisson

$$\nabla^2 V_H(x,y) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon}\left[n(x,y) - N_d(x,y) + N_a(x,y)\right], \tag{2.26}$$

onde ϵ é a constante dielétrica do meio, $n(x,y)$ a densidade eletrônica e N_d e N_a são respectivamente as densidades de doadores ionizados e aceitadores residuais ionizados. Aqui designaremos $N_I(x,y)$ como a densidade total de dopantes ionizados, ou seja, $N_I(x,y) = N_d(x,y) - N_a(x,y)$.

A densidade eletrônica é dada por

$$n(x,y) = \sum_i N_{i,k_z}|\phi_{i,k_z}(x,y)|^2, \tag{2.27}$$

onde N_i é o número total de elétrons na i-ésima sub-banda,

$$N_{i,k_z} = \begin{cases} \dfrac{L_z}{\pi a_0^*}\cdot\sqrt{\dfrac{K_B T 2m^* a_0^{*2}}{\hbar^2}}F_{-1/2}(\eta_{i,k_z}) & \text{se } T \neq 0 \\ \dfrac{2L_z}{\pi a_0^*}\cdot\sqrt{\dfrac{2m^* a_0^{*2}}{\hbar^2}}\cdot\sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_i(k_z)} & \text{se } T = 0 \end{cases} \tag{2.28}$$

e $\varepsilon_i(k_z)$ é a energia da i-ésima sub-banda, T a temperatura e ε_F é a energia de Fermi. $F_{-1/2}(\eta_{i,k_z})$, é a função de Fermi-Dirac, onde $\eta_{i,k_z} = (\varepsilon_F - \varepsilon_i(k_z))/K_B T$. Por uma questão de simplificação usamos a seguinte aproximação para a função de Fermi-Dirac

que apresenta um erro inferior a 1% (ver referência [90], outras aproximações podem ser encontradas em [91,92]):

$$F_{-1/2}(\eta) = \left(\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{b+\eta+(|\eta-b|^c+a^c)^{1/c}}} + \frac{e^{-\eta}}{\sqrt{\pi}} \right)^{-1} \tag{2.29}$$

onde,

$$\begin{aligned} a &= 1.69742452 \\ b &= 1.495 \\ c &= 2.828427125 \end{aligned} .$$

2.3 Solução da Equação de Schrödinger: Propagação em Duas Dimensões

Conforme o que foi apresentado na seção 2.1.1, podemos ver que a função de onda em um instante $t + \Delta t$ pode ser escrita como:

$$\Psi(x,y,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(x,y)\Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{iP^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{iV(x,y)\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(x,y,t) \tag{2.30}$$

onde o erro cometido na equação acima é da ordem de $(\Delta t)^3$.

Para fazermos a evolução temporal da função de onda, devemos inicialmente calcular o seguinte termo,

$$\xi(x,y,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(x,y)\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(x,y,t), \tag{2.31}$$

e em seguida, devemos aplicar o operador contendo a energia cinética ao resultado obtido, ou seja,

$$\eta(x,y,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iP^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(x,y,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iP_x^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{iP_y^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(x,y,t+\Delta t). \tag{2.32}$$

Como os operadores de energia cinética são separáveis, podemos escrever

$$\chi(x, y, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iP_y^2 \Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(x, y, t + \Delta t) \tag{2.33}$$

ou reescrever na seguinte forma:

$$\left(1 - i\frac{\hbar \Delta t}{4m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \cdot \chi(x, y, t + \Delta t) = \left(1 + i\frac{\hbar \Delta t}{4m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \cdot \xi(x, y, t + \Delta t), \tag{2.34}$$

onde, o lado direito da equação acima é conhecido, e como no caso unidimensional o problema foi transformado em um sistema linear cuja a matriz associada é tridiagonal e cuja a solução é facilmente encontrada. Uma vez encontrado $\chi(x, y, t + \Delta t)$, devemos aplicar o operador $\exp\left(-\frac{iP_x^2 \Delta t}{2m\hbar}\right)$ sobre ele. Se o sistema for finito em ambas direções devemos fazer é repetir o procedimento anterior para a direção x e depois multiplicarmos o resultado por $\exp\left(-i\frac{V(x, y)\Delta t}{2\hbar}\right)$, mas se o sistema for periódico na direção x devemos usar o algoritmo da *Fast Fourier Transform (FFT)*.

2.3.1 Método da Transformada de Fourier

O método da transformada de Fourier implica em condições de contorno periódicas nas quais x_{N_x} está conectado com x_1, onde N_x é o número de pontos da rede na direção x. Estas condições de contorno são naturais para descrevermos os problemas que possuem uma periodicidade espacial. Para problemas onde as condições de contorno naturais não são periódicas, devemos aumentar o tamanho da rede de tal modo que não haja uma interferência das bordas no sistema em estudo. O preço que pagamos em resolver este tipo de problema usando o método da transformada de Fourier é que devemos aumentar o número de pontos da rede, já que a rede deve ser uniforme, e conseqüentemente aumentaremos o tempo computacional.

Para o sistema periódico, o próximo passo, será calcular o seguinte termo:

$$\eta(x, y, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iP_x^2 \Delta t}{2m\hbar}\right] \chi(x, y, t + \Delta t), \tag{2.35}$$

usando o método da transformada de Fourier.

Antes de calcularmos este termo, definiremos a transformada de Fourier direta e a sua inversa como:

$$\mathcal{F}[\chi(x)] = \chi(k) = \sum_x e^{ikx} \chi(x), \tag{2.36}$$

$$\mathcal{F}^{-1}[\chi(k)] = \chi(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_k e^{-ikx} \chi(k). \tag{2.37}$$

Como $\chi(x)$ é uma função de onda de um sistema periódico, então podemos usar o teorema de Bloch, o qual nos diz que uma autofunção da equação de Schrödinger para um potencial periódico é o produto de uma onda plana e^{iqx} por uma função $u_q(x)$ que tem a mesma periodicidade do potencial, para escrever $\chi(x)$ como:

$$\chi(x) = e^{iqx} u(x), \tag{2.38}$$

onde, por uma questão de simplicidade, escreveremos $\eta(x)$ em vez de $\eta(x, y, t + \Delta t)$.

Substituindo a eq. (2.37) na eq. (2.35), podemos escrever $\eta(x)$ como,

$$\eta(x) = \exp\left(i\frac{\hbar \Delta t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \frac{1}{2\pi} \sum_k e^{-ikx} \chi(k), \tag{2.39}$$

$$\eta(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_k \exp\left(i\frac{\hbar \Delta t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) e^{i(q-k)x} u(k)$$

$$\eta(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_k e^{-ikx} \underbrace{\exp\left(-i\frac{\hbar \Delta t}{2m}(q-k)^2\right) e^{iqx} u(k)}_{\eta(k)}, \tag{2.40}$$

Como,

$$\eta(k) = \sum_x e^{ikx}\eta(x) = \mathcal{F}[\eta(x)], \tag{2.41}$$

então, substituindo a eq. (2.40) na eq. (2.41), obtemos

$$\eta(K) = \sum_x e^{iKx}\frac{1}{2\pi}\sum_k e^{-ikx}\exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(q-k)^2\right)e^{iqx}u(k)$$

$$\eta(K) = \sum_x e^{iKx}\frac{1}{2\pi}\sum_k e^{-ikx}\exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(q-k)^2\right)e^{iqx}\sum_{x'} e^{ikx'}u(x')$$

$$\eta(K) = \frac{1}{2\pi}\sum_k \exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(q-k)^2\right)\sum_{x'} e^{ikx'}u(x')\underbrace{\sum_x e^{i(K+q-k)x}}_{2\pi\delta_{k,K+q}}$$

$$\eta(K) = \exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(K)^2\right)\underbrace{\sum_{x'} e^{iKx'}\overbrace{e^{iqx'}u(x')}^{\chi(x)}}_{\chi(K)}$$

$$\eta(x) = \mathcal{F}^{-1}\left[\exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(K)^2\right)\mathcal{F}[\chi(x)]\right]$$

agora usando o fato de que a delta de Kronecker $\delta_{k,K+q}$, a qual apareceu no desenvolvimento desta expressão, estabelece a seguinte relação $K = k - q$ entre k, K e q, então podemos reescrever a equação acima como:

$$\eta(x, y, t + \Delta t) = \mathcal{F}^{-1}\left[\exp\left(-i\frac{\hbar\Delta t}{2m}(k-q)^2\right)\mathcal{F}[\chi(x)]\right] \tag{2.42}$$

Desta forma, conseguimos escrever uma expressão para $\eta(x, y, t + \Delta t)$ em uma forma mais conveniente computacionalmente. Para obtermos $\Psi(x, y, t + \Delta t)$ basta multiplicarmos $\eta(x, y, t + \Delta t)$ por $\exp\left(-i\frac{V(x,y)\Delta t}{2\hbar}\right)$, ou seja,

$$\Psi(x, y, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{V(x, y)\Delta t}{2\hbar}\right)\eta(x, y, t + \Delta t). \tag{2.43}$$

Como pretendemos resolver um problema autoconsistentemente, precisamos estabelecer um procedimento para a solução da equação de Poisson.

2.4 Solução da Equação de Poisson

Agora iremos examinar como será resolvida a equação de Poisson em duas dimensões, no caso em que umas das direções é periódica e a outra é finita. A equação de Poisson para o potencial de Hartree é

$$\nabla^2 V_H = \frac{4\pi e^2}{\epsilon}[N_d(x, y) - N_a(x, y) - n(x, y)], \tag{2.44}$$

onde, ϵ é a constante dielétrica do meio, $n(x, y)$ a densidade eletrônica e $N_d(x, y)$ e $N_a(x, y)$ são respectivamente as densidades de impurezas doadoras ionizadas e de aceitadoras residuais ionizadas.

Para escrevermos a equação acima em unidades adimensionais, devemos multiplicá-la por a_0^{*2}/Ry^*, onde $Ry^* = \dfrac{e^2}{2a_0^*}$, obtendo assim:

$$\nabla^2 V_H = 8\pi\rho(x, y), \tag{2.45}$$

onde, $\rho(x, y) = \dfrac{a_0^{*3}}{\epsilon}[N_d(x, y) - N_a(x, y) - n(x, y)]$.

Devido ao fato do nosso problema ser periódico em uma direção, podemos resolver a transformada de Fourier da eq. (2.45), que é uma equação unidimensional. Uma vez que podemos escrever,

$$V_H(x, y) = \mathcal{F}[v(k_x, y)] = \frac{1}{2\pi}\sum_{k_x} e^{-ik_x x} v(k_x, y) \tag{2.46}$$

$$\rho(x,y) = \mathcal{F}[\rho(k_x,y)] = \frac{1}{2\pi}\sum_{k_x} e^{-ik_x x}\rho(k_x,y), \tag{2.47}$$

então para obtermos a transformada de Fourier da equação de Poisson (2.45), devemos substituir a eq. (2.46) e (2.47) na eq. (2.45), obtendo assim:

$$-k_x^2 v(k_x,y) + \frac{\partial^2 v(k_x,y)}{\partial y^2} = 8\pi\rho(k_x,y)$$

$$\frac{\partial^2 v(k_x,y)}{\partial y^2} - k_x^2 v(k_x,y) = 8\pi\rho(k_x,y). \tag{2.48}$$

Usando o método das diferenças finitas em uma rede não uniforme, obtemos que:

$$\frac{2v_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}(\Delta y_{j-1}+\Delta y_j)} - \left(\frac{2}{\Delta y_{j-1}\Delta y_j} + k_x^2\right) v_{ij} + \frac{2v_{i,j+1}}{\Delta y_j(\Delta y_{j-1}+\Delta y_j)} = 8\pi\rho_{ij}. \tag{2.49}$$

onde escrevemos v_{ij} em vez de $v(k_x,y)$ e ρ_{ij} em vez de $\rho(k_x,y)$. A equa
ser reescrita da seguinte forma:

$$a_j v_{i,j-1} + b_j v_{i,j} + c_j v_{i,j+1} = 4\pi\rho_{ij}, \tag{2.50}$$

onde, os coeficientes a_j, b_j e c_j são dados por:

$$a_j = \frac{1}{\Delta y_{j-1}(\Delta y_{j-1}+\Delta y_j)}$$

$$b_j = -\left(\frac{1}{\Delta y_{j-1}\Delta y_j} + \frac{k_x^2}{2}\right)$$

$$c_j = \frac{1}{\Delta y_j(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)}.$$

2.4.1 Condições de Contorno para a Equação de Poisson

Iremos analisar o caso geral em que $V_H(x, y_0) = V_0(x)$ e de forma análoga $V_H(x, y_{end}) = V_{end}(x)$. Para levarmos em conta estas condições de contorno, devemos introduzir os pontos $j = 0$ e $j = N_y + 1$ em nossa rede, como mostramos na figura 2.2 abaixo. Nestes pontos o potencial tem o seguintes valores $v_{i,0}$ e v_{i,N_y+1}. Portanto, para os pontos $j = 1$ e $j = N_y$, o potencial de Hartree pode ser escrito como:

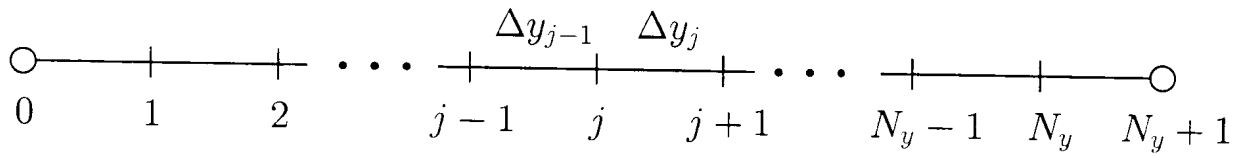


Figura 2.2: Condições de contorno para o potencial

$$-\left(\frac{2}{\Delta y_0 \Delta y_1} + k_x^2\right) v_{i,1} + \frac{2v_{i,2}}{\Delta y_1(\Delta y_0 + \Delta y_1)} = 8\pi\rho_{i,1} - \frac{2v_{i,0}}{\Delta y_0(\Delta y_0 + \Delta y_1)} \tag{2.51}$$

$$-\left(\frac{2}{\Delta y_{N_y-1}\Delta y_{N_y}} + k_x^2\right) v_{i,N_y} + \frac{2v_{i,N_y-1}}{\Delta y_{N_y-1}(\Delta y_{N_y-1} + \Delta y_{N_y})} = 8\pi\rho_{i,N_y} - \frac{2v_{i,N_y+1}}{\Delta y_{N_y}(\Delta y_{N_y-1} + \Delta y_{N_y})} \tag{2.52}$$

Definindo,

$$\begin{aligned} \rho^*_{i,0} &= \frac{1}{8\pi} \cdot \frac{2v_{i,0}}{\Delta y_0(\Delta y_0 + \Delta y_1)} \\ \rho^*_{i,N_y} &= \frac{1}{8\pi} \cdot \frac{2v_{i,N_y+1}}{\Delta y_{N_y}(\Delta y_{N_y-1} + \Delta y_{N_y})}, \end{aligned} \tag{2.53}$$

podemos escrever o potencial de Hartree da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 & c_4 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_5 & b_5 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & c_{N_y-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{N_y-1} & b_{N_y} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_{i,1} \\ v_{i,2} \\ v_{i,3} \\ v_{i,4} \\ v_{i,5} \\ \vdots \\ v_{i,N_y} \end{pmatrix} = 8\pi \begin{pmatrix} \rho_{i,1} - \rho^*_{i,0} \\ \rho_{i,2} \\ \rho_{i,3} \\ \rho_{i,4} \\ \rho_{i,5} \\ \vdots \\ \rho_{i,N_y} - \rho^*_{i,N_y} \end{pmatrix} \tag{2.54}$$

Aqui vemos que o nosso problema foi transformado em um sistema linear cuja a matriz associada é tridiagonal. A solução deste sistema é a matriz inversa dos coeficientes a_j, b_j e c_j. As condições de contorno necessárias para resolvermos a equação acima são as seguintes (ver figura 2.3 abaixo):

- O campo elétrico deve ser nulo no *bulk*, com o potencial sendo dado pelo valor da energia do fundo da banda de condução em relação ao nível de Fermi (a energia de Fermi foi escolhida como referência em nossos cálculos):

$$\frac{dv(k_x, y_{bulk})}{dy} = 0 \quad ; \quad v(k_x, y_{bulk}) = V_{bulk}(k_x) = E_c - E_F \ .$$

  Na prática, o que fazemos é encontrar um valor para $y = y_{bulk}$ tal que

$$\frac{dv(k_x, y_{bulk})}{dy} = 0$$

  quando $v(k_x) = V_{bulk}(k_x) = E_c - E_F$.

- Para sistemas submetidos a um campo elétrico externo as condições de contorno são diferentes. Para esses sistemas o fundo da banda de condução em relação ao nível de Fermi na superfície é diferente do volume, mas é bem determinado. Neste caso o potencial na superfície da amostra é dado por

$$V_0 = e\phi_T - eV_G \ ,$$

onde $e\phi_T$ é chamado de potencial de contato e depende do material usado para fazer o contato metal–semicondutor (barreira Schottky) e V_G é a tensão elétrica externa.

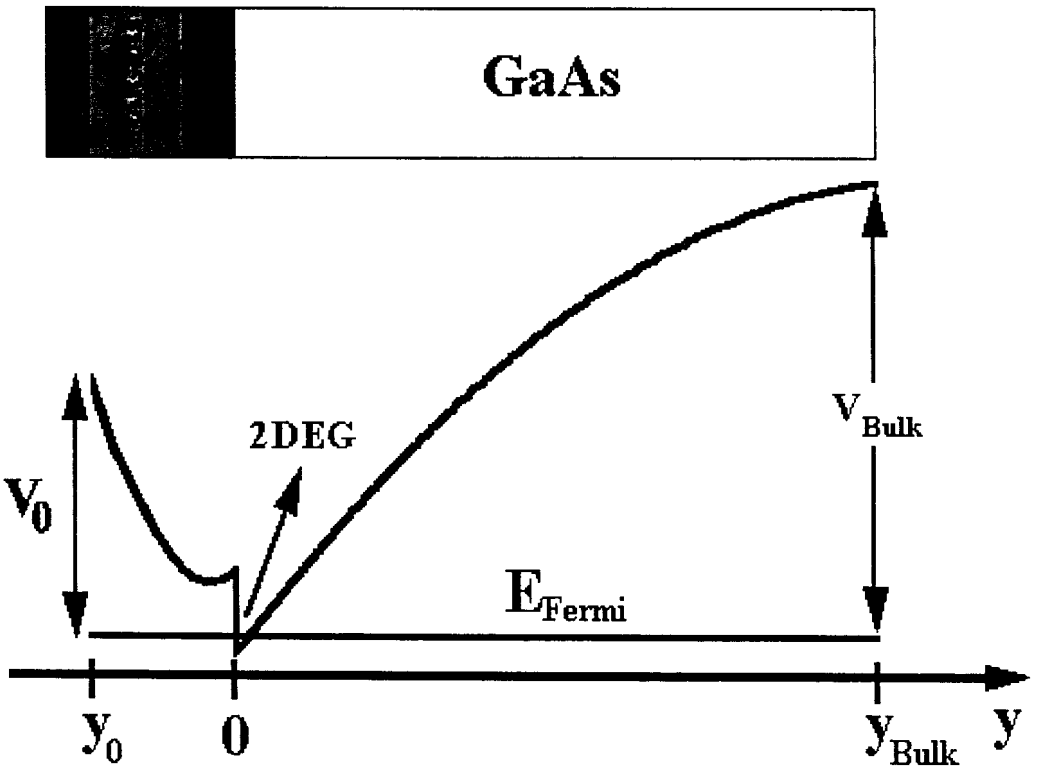


Figura 2.3: Representação esquemática do perfil de potencial de uma heteroestrutura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$.

Uma vez encontrada a transformada de Fourier do potencial de Hartree, v_{ij}, ou seja, $v(k_x, y)$, nós obtemos o potencial de Hartree fazendo a transformada de Fourier, ou seja,

$$V_H(x, y) = \mathcal{F}[v(k_x, y)] = \frac{1}{2\pi} \sum_{k_x} e^{-ik_x x} v(k_x, y). \tag{2.55}$$

Capítulo 3

Fios Quânticos do tipo "V-Groove "

Neste capítulo iremos estudar as propriedades eletrônicas de fios quânticos do tipo *v-groove*, ou seja fios formados na interface corrugada da heteroestrutura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, usando o método apresentado no capítulo 2. Neste sistema investigamos a natureza do confinamento do gás de elétrons, verificando se ele apresenta um caráter de gás de elétrons quase-2D ou quase-1D, e a região onde ele irá ocorrer. Investigamos também os efeitos da temperatura, da densidade de impurezas doadoras e do *spacer* nas propriedades eletrônicas dos fios quânticos, onde verificamos que a densidade de impurezas doadoras é um dos parâmetros mais relevantes para as propriedades eletrônicas do sistema estudado, ou seja, ela é o fator determinante na forma e localização do confinamento dos portadores neste sistema.

3.1 Sistemas Quase-1D Corrugados

Uma grande variedade de estruturas semicondutoras podem ser obtidas hoje devido ao desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial, litografia e da corrosão química (ver figura 3.1). O atual estado da arte, está na utilização conjunta destas técnicas, o que viabiliza a fabricação de nanoestruturas com potenciais de confinamento de formas geométricas variadas. Há pouco tempo foi proposto um novo método de preparação de fios quânticos, e este consiste basicamente do crescimento epitaxial de poços

quânticos diretamente em substratos padronizados não planares. O mecanismo se baseia no fato de que o crescimento epitaxial em semicondutores III-V ocorre preferencialmente nas superfícies vicinais em vez da direção (100). Para obtermos fios quânticos, o crescimento epitaxial de poços quânticos de $GaAs/AlGaAs$ deverá ser feito em um substrato de $GaAs$ no qual o padrão dos canais tenha sido obtido através de uma corrosão química (ver figura 3.1). Na figura 3.1, mostramos canais de diversas formas geométricas, os quais são obtidos através de alguns processos de corrosões químicas, e isto ocorre, porque cada processo possui uma direção preferencial de corrosão. Atualmente o interesse tanto teórico [1, 2, 28, 34, 47, 48, 55, 69, 84–86] quanto experimental [7, 10–12, 30, 79, 80, 82] por estas estruturas do tipo *v-groove* vem aumentando, devido ao seu potencial de aplicação em dispositivos opto-eletrônico.

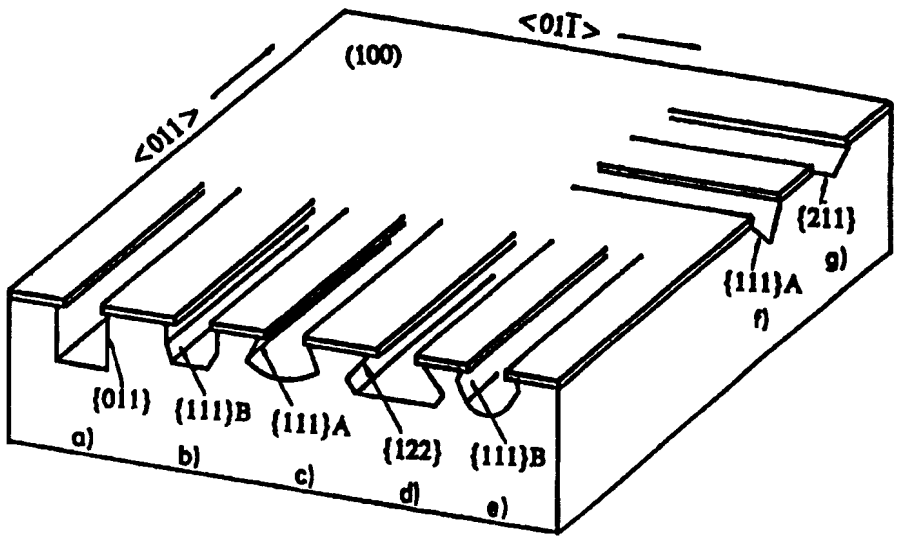


Figura 3.1: Canais de diferentes formas geométricas obtidos por diferentes processos de corrosão química.

Kerkhoven et al. simularam autoconsistentemente o confinamento de elétrons em fios quânticos formados nos cantos de uma estrutura periódica do tipo dentes de uma serra, consistindo de camadas de $Al_xGa_{1-x}As$ e $GaAs$ (ver figura 3.2 abaixo). Em seus cálculos eles encontraram que a formação de fios quânticos nos cantos da camada de $GaAs$

é muito sensível aos parâmetros físicos das camadas vizinhas de $Al_xGa_{1-x}As$. Todos os resultados obtidos por eles foram para uma temperatura fixa de 4.2 K. Eles investigaram a influência da concentração de Al na formação do fio quântico, de tal forma que somente o estado fundamental estivesse populado.

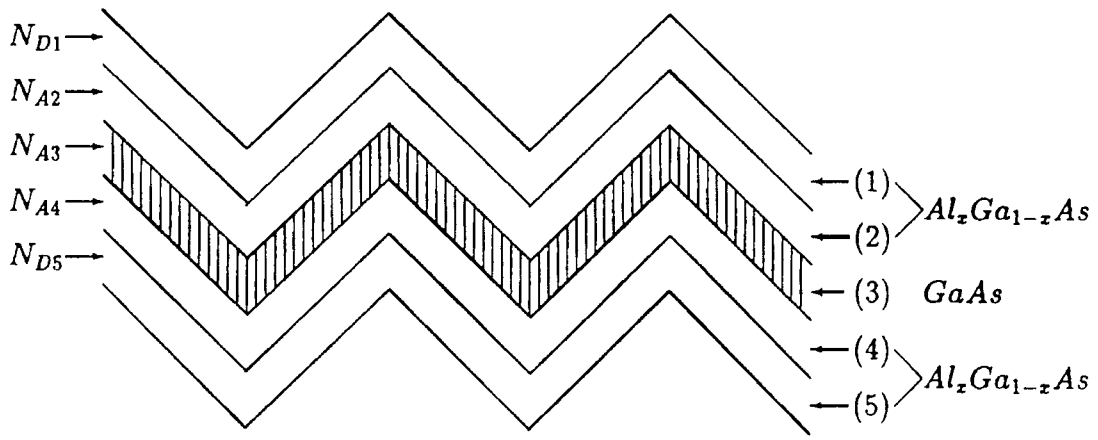


Figura 3.2: Super-rede de poços quânticos.

Recentemente, Sawada et al. [1] propuseram e investigaram uma heteroestrutura de $n - Al_xGa_{1-x}As\,/\,u - GaAs$ (o $u - GaAs$ significa que a camada de $GaAs$ possui uma dopagem não intencional, ou seja, "*undoped*" $GaAs$), com interface corrugada de dopagem modulada (ver Fig. 3.3), esperando obter uma distribuição não uniforme de elétrons na interface do $n - Al_xGa_{1-x}As$ com o $u - GaAs$, a qual produziria um gás de elétrons unidimensional na região côncava do $GaAs$, eles fizeram simulações semi-clássicas de difusão e deriva (ver apêndice B) para esta heteroestrutura, e os resultados obtidos por eles para o potencial (ver figura 3.4) e para a densidade eletrônica indicavam a natureza quase-unidimensional do sistema eletrônico.

Posteriormente, investigando as possíveis aplicações da heteroestrutura corrugada com dopagem modulada em dispositivos eletrônicos de dimensões da ordem de algumas centenas de Angstrons, Vacek et al. [2], resolveram a equação de Schrödinger com o intuito de mostrar que deveriam existir estados quânticos unidimensionais na heteroestrutura com

interfaces corrugadas. Para resolver a equação de Schrödinger eles usaram as seguintes condições de contorno [ver Fig. 3.4 (a)]: Na direção x as condições de contorno são periódicas. Na direção y a condição de contorno usada foi a de paredes duras (potencial infinito). Os parâmetros utilizados foram os seguintes: concentração de $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ é 1.0×10^{18} cm^{-3}, a densidade de portadores do tipo-p $u - GaAs$ é 1.0×10^{14} cm^{-3}, e o ângulo devido a corrugação na interface é de 90°. O período do sistema na direção x é $\sqrt{2} \times 600$ Å $\approx$ 845.5 Å. A separação das bandas de condução do $GaAs$ e do $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ é $\Delta E_c = 0.224$ eV. A área investigada foi de 845.5 Å $\times$ 845.5 Å, a qual para efeitos de cálculo numérico, foi discretizada em uma malha uniforme de 80×80 pontos.

A partir da forma geométrica do sistema, com um período de corrugação ($\approx$ 850 Å) muitas vezes maior do que a espessura da camada de inversão ($\approx$ 150 Å), Vacek et al. [2] esperavam que os estados quânticos unidimensionais estivessem próximos uns dos outros, separados somente por um pequeno gap de energia. Entretanto, os seus resultados apresentam espaçamentos de energia entre as sub-bandas de energias unidimensionais comparáveis a energia térmica de ativação K_BT a uma temperatura de alguns kelvins, já que cada 1 meV equivale aproximadamente a uma temperatura de 11.60 K (ver figura 3.5).

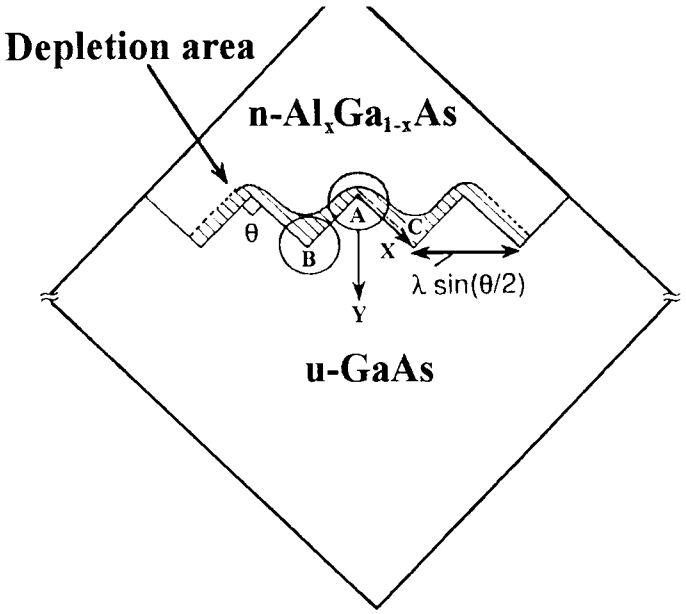


Figura 3.3: Corte secional da estrutura $n - Al_xGa_{1-x}As/u - GaAs$, mostrando uma interface que apresenta um perfil de potencial periódico do tipo dentes de uma serra. A região (A) é região côncava do $GaAs$ e a região (B) é a região convexa do $GaAs$.

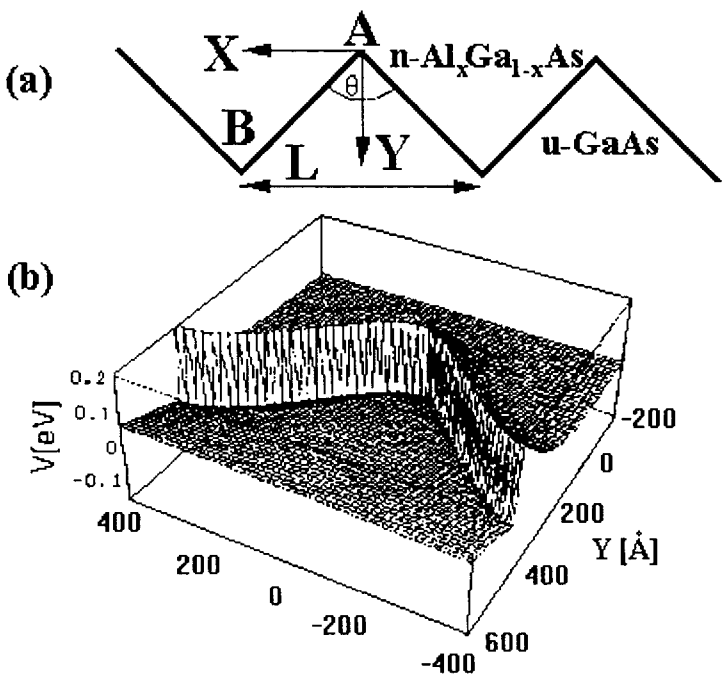


Figura 3.4: Potencial obtido por Sawada et al. [1] e usado por Vacek et al. [2] para calcular os níveis de energia deste sistema.

Para este sistema eles encontraram que o estado fundamental é o único estado que está ocupado, como podemos ver na Fig. 3.5 , onde é apresentado um diagrama de bandas obtido através de um cálculo semi-clássico de difusão e deriva (ver [1] e apêndice B). Este diagrama mostra que a distância entre o fundo do potencial na camada de inversão e o estado fundamental, assim como a distância em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado é muito grande. Eles atribuem estas grandes separações de energia como sendo causadas pelo potencial efetivo ao longo da camada de inversão na heteroestrutura corrugada com dopagem modulada onde a profundidade do poço é formada em torno do canto côncavo da região do $GaAs$. Sem a dopagem modulada um sistema corrugado similar com uma largura de 150 Å e um período de 850 Å teria níveis de energia separados por menos de 1 meV, ou seja, ao resolvermos somente a equação de Schrödinger para um potencial com estas dimensões laterais, desprezando completamente a distribuição de impurezas no sistema, obtemos níveis de energia separados por menos de 1 meV. Comparando os estudos teóricos [69, 84] e experimentais [7] feitos em sistemas corrugados não dopados, estas grandes separações dos níveis de energia como as apresentadas na Fig. 3.5 , poderão ser vistas somente em um gás de elétrons confinado em uma área com dimensões laterais menores do que 200 Å.

Na Fig. 3.6, mostramos a função de onda do estado fundamental, a qual mostra um pico agudo em torno do canto côncavo do $GaAs$. A largura média deste pico é da ordem de 100 Å. O *overlapping* entre as autofunções nas proximidades do canto côncavo do $GaAs$ em distâncias iguais ao período da corrugação ($\approx$ 850 Å) é desprezível. Portanto, os elétrons na primeira sub-banda formam um canal quântico unidimensional quase ideal localizado próximo ao canto côncavo do $GaAs$. O gás de elétrons está densamente condensado em único modo da guia de onda.

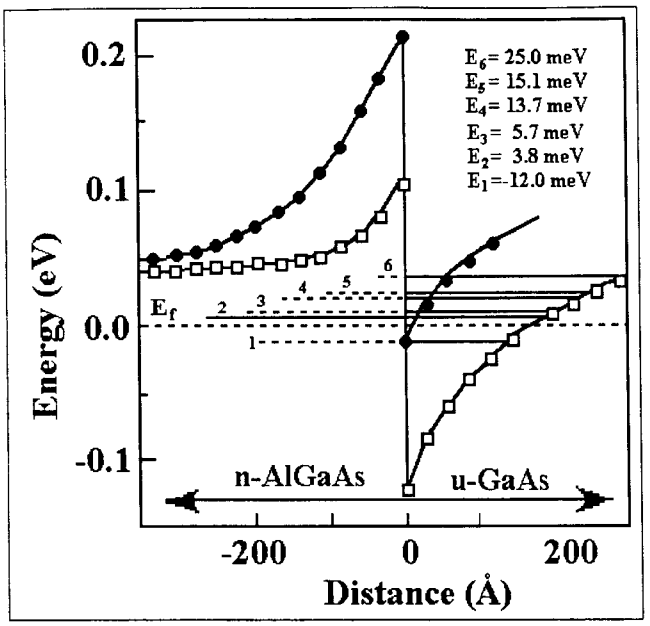


Figura 3.5: Diagramas de energia calculados nos pontos A (□) (região côncava do $GaAs$) e B (•) (região convexa do $GaAs$).

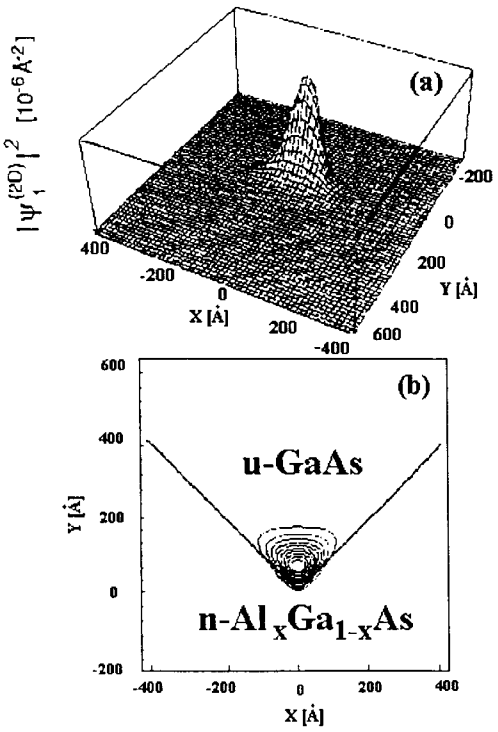


Figura 3.6: (a) Densidade de probabilidade do estado fundamental. (b) curvas de nível da densidade de probabilidade do estado fundamental. Resultado de Vacek et al. [2].

3.2 Modelo Teórico

O modelo investigado por Vacek et al. [2] é bem simples e portanto não esperamos que os seus resultados descrevam bem o sistema apresentado na Fig. 3.3, pois o mesmo é bastante sensível aos parâmetros de fabricação. Para obtermos uma descrição mais realística deste sistema usamos uma aproximação autoconsistente para investigá-lo, ou seja, resolvemos autoconsistentemente as equações de Schrödinger e Poisson. A solução da equação de Schrödinger é baseada na técnica do *Split-Operator* (ver capítulo 2), enquanto a da equação de Poisson leva em conta o fato do sistema ser periódico na direção x.

O sistema que iremos investigar neste capítulo é constituído por uma heteroestrutura de $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As/\,GaAs$ com uma interface corrugada de dopagem modulada (ver Fig. 3.7) e com um *gate* aplicado ao topo da heteroestrutura. Ao incluirmos uma voltagem aplicada ao *gate*, obtemos um parâmetro com o qual podemos controlar a população dos níveis de energia. Com o *spacer*, obtemos um gás de elétrons com um mínimo de centros espalhadores, aumentando assim sua mobilidade. Estamos considerando que as impurezas aceitadoras estão distribuídas uniformemente sobre todos o sistema, e que as impurezas doadoras estão distribuídas uniformemente somente sobre uma camada finita, tipicamente da ordem de 400 Å, não indo necessariamente ao bulk. O sistema que estamos investigando está uniformemente dopado com uma densidade residual de impurezas aceitadoras ionizadas de $N_A = 5.0 \times 10^{15}$ cm^{-3}. Nossos cálculos foram realizados considerando que esta heteroestrutura possui um período de corrugação de 806 Å e que o ângulo entre as faces na interface da heteroestrutura é de 90° (ver figura 3.4).

Resolvendo somente a equação de Poisson para este sistema verificamos que o mesmo é muito sensível à densidade de impurezas doadoras, já que a região de confinamento depende muito mais da densidade de impurezas doadoras do que de outros parâmetros tais como voltagem aplicada ao *gate*, *spacer*, ou largura (tamanho) da ca-

mada de impurezas doadoras. Na figura 3.8, mostramos como impomos as condições de contorno para o potencial do sistema ao longo da direção y, já na direção x, o sistema é periódico, e o potencial na superfície é constante. Na figura 3.9 mostramos uma representação esquemática de um potencial obtido autoconsistentemente, e para este sistema temos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava do $GaAs$.

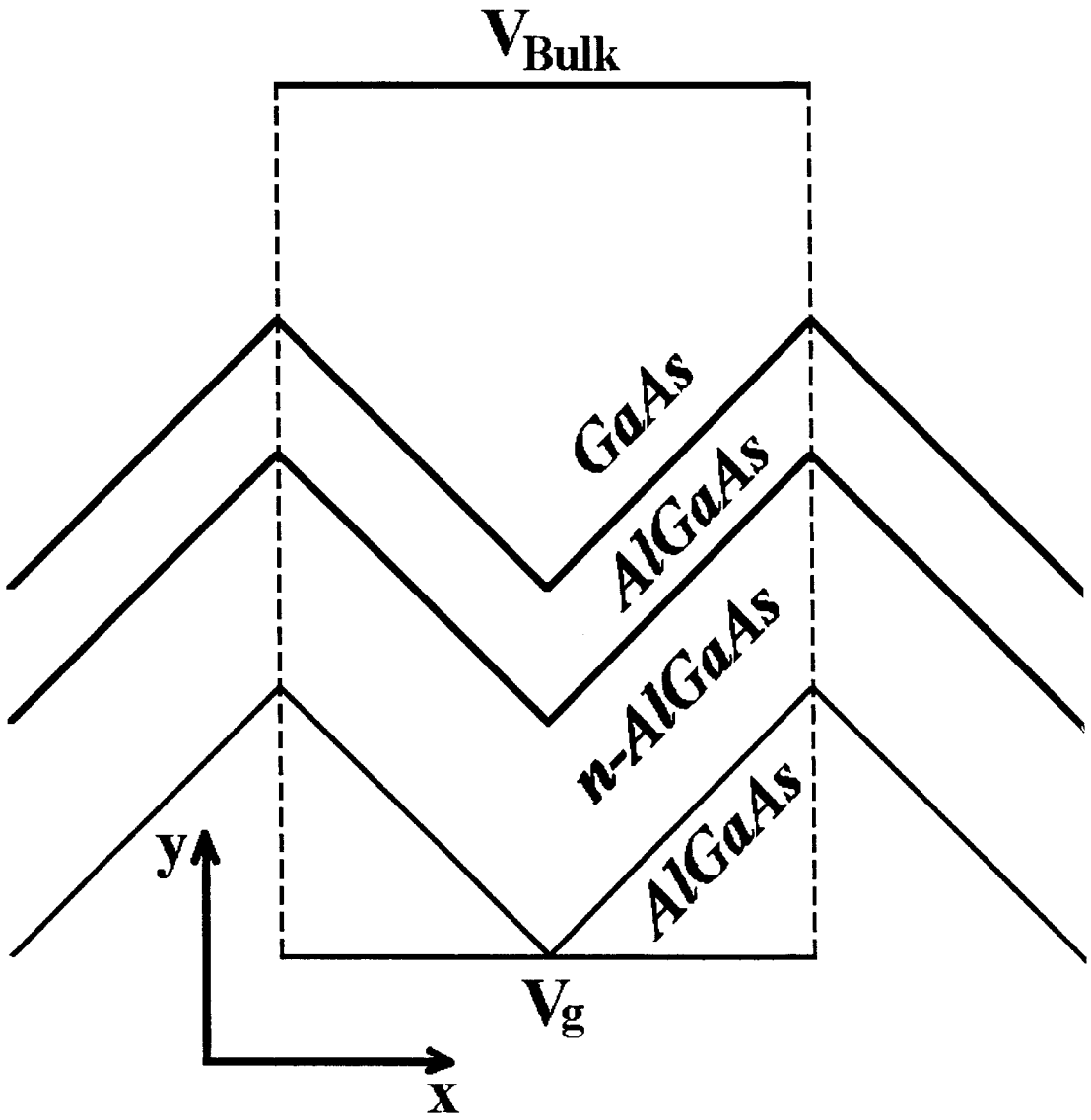


Figura 3.7: Representação esquemática da heteroestrutura $n - Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ corrugada com dopagem modulada, e com um *gate* aplicado ao topo da heteroestrutura.

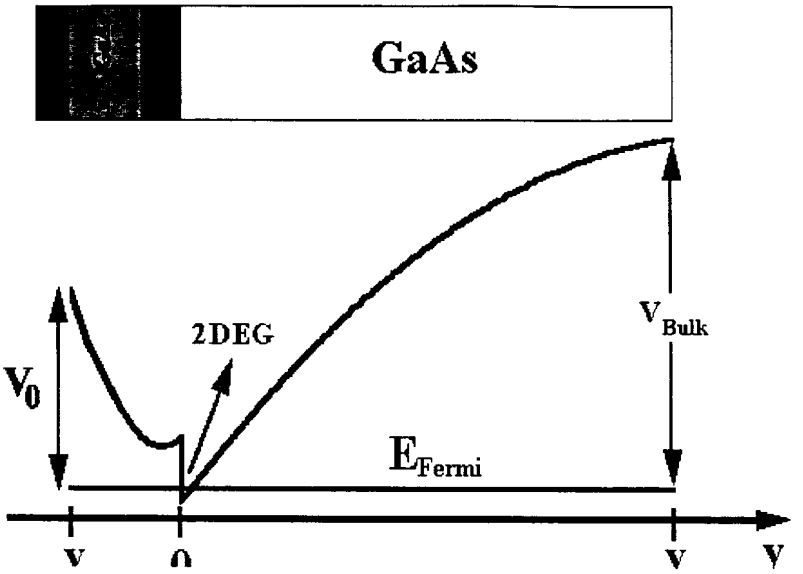


Figura 3.8: Representação esquemática da formação do gás de elétrons quase-bidimensional, na interface da heteroestrutura n-$Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, com as respectivas condições de contorno usadas em sua simulação.

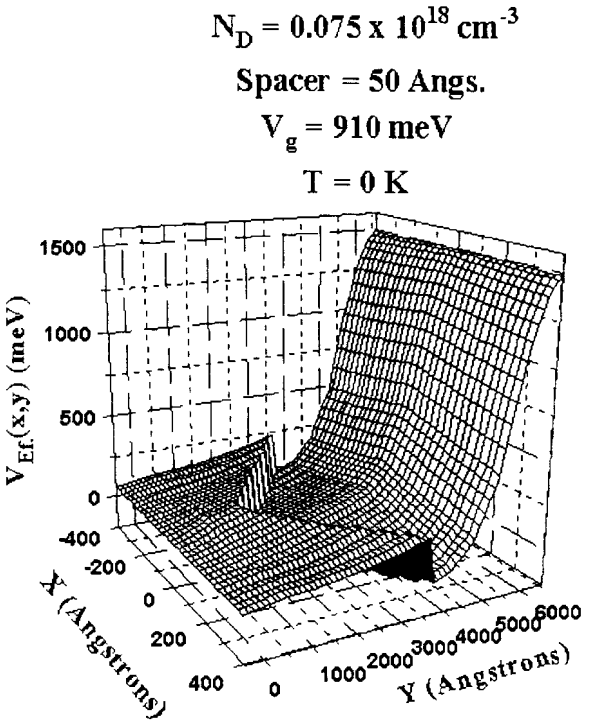


Figura 3.9: Representação esquemática do potencial autoconsistente de uma heteroestrutura $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As/\,GaAs$ com interface corrugada de dopagem modulada.

3.3 Efeitos da Densidade de Impurezas Doadoras

Nesta heteroestrutura corrugada (figura 3.7), verificamos que é a densidade de impurezas doadoras é que irá definir em que região teremos a formação de um gás de elétrons quase-1D, se na côncava ou na convexa. Para investigarmos, os efeitos da densidade de impurezas doadoras, iremos manter uma temperatura de 0 K, um spacer de 0 Å e a largura da camada de impurezas doadoras de 400 Å. A voltagem aplicada ao *gate* será usada para mantermos somente o estado fundamental do sistema populado, já que está não tem um efeito sobre a região onde ocorrerá o confinamento. No sistema que estamos investigando os pontos A e B da Fig. 3.4, tem respectivamente as seguintes coordenadas $(0,0)$ e $(\pm 400, 400)$. O ponto A está nos indicando a região côncava do $GaAs$ enquanto o ponto B a região convexa do $GaAs$.

Na tabela 3.1, para cada densidade de impurezas doadoras, apresentamos os níveis de energia com suas respectivas ocupações. Para cada sistema, procuramos encontrar uma voltagem que deixasse somente o estado fundamental do sistema populado. Desta tabela de energias pode se ver que a medida que aumentamos a densidade de impurezas doadoras o espaçamento em energia entre as diversas sub-bandas vai diminuindo e posteriormente passa a aumentar. Por exemplo, para $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} temos que a energia do estado fundamental dos dois sistemas estão bem próximas, e o espaçamento em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado em cada sistema diminuiu. Para $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3}, temos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava do GaAs, enquanto que para $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} o gás de elétrons está completamente estendido sobre o sistema. Esta mesma comparação pode ser feita para as densidades $N_D = 0.75 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3}, e iremos encontrar que os níveis de energia estão próximos e que a separação em energia entre as duas primeiras sub-bandas dos dois sistemas aumentou.

Tabela 3.1: Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura zero e um *spacer* de 0 Å.

Temperatura = 0 e Spacer = 0 Å					
N_D ($\times 10^{18}$ cm^{-3})	V_g (meV)	E_1 (meV)	E_2 (meV)	E_3 (meV)	E_4 (meV)
0.025	980	-0.06493	20.8866	23.9764	43.8958
Ocupação		0.00012	0.0000	0.0000	0.0000
0.05	960	-0.42217	7.5491	10.6746	19.6813
Ocupação		0.00031	0.0000	0.0000	0.0000
0.075	900	-0.2026	3.2218	5.5925	12.4283
Ocupação		0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	850	-0.4907	1.3486	4.4798	11.5896
Ocupação		0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
0.25	405	-0.3616	12.3398	28.2292	43.0497
Ocupação		0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
0.5	0.0	-11.0122	-4.8478	2.5822	12.6495
Ocupação		0.0016	0.0010	0.0000	0.0000

Na figura 3.10 apresentamos as curvas de níveis da densidade de probabilidade $|\Psi_i(x,y)|^2$, na qual vemos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava do $GaAs$, com um raio médio da ordem de 100 Å estando bem localizado nesta região. Já na figura 3.13, apresentamos duas seções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}, a qual nos mostra uma diferença de 100 meV em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å na interface entre o $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e o $GaAs$.

Na seqüência de figuras de 3.10 à 3.21, podemos verificar uma mudança na forma e na região do confinamento do gás de elétrons. Para baixas densidades o sistema passa a apresentar um gás de elétrons quase-1D confinado na região côncava do $GaAs$ como mostra as curvas de níveis das densidade de probabilidade $|\Psi_i(x,y)|^2$. Existe um intervalo intermediário de densidade de impurezas doadoras no qual o gás de elétrons fica completamente estendido sobre todo o sistema. Já para densidades um pouco maiores o sistema passa a apresentar um gás de elétrons quase-1D confinado na região convexa do $GaAs$, em vez da região côncava. Esta mudança de comportamento deve-se unicamente a densidade

de impurezas doadoras no sistema, os outros parâmetros do sistema não alteram sozinhos a forma e a região de confinamento do gás de elétrons.

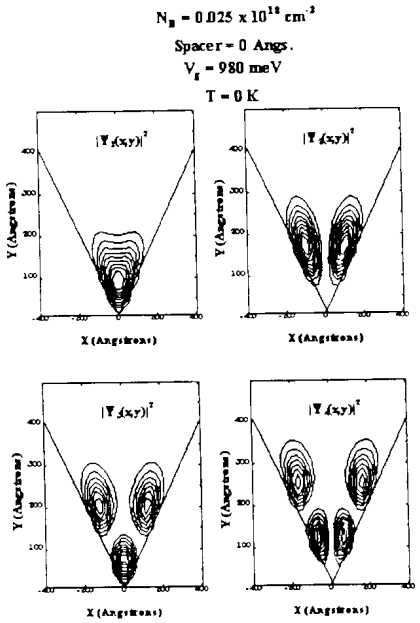


Figura 3.10: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

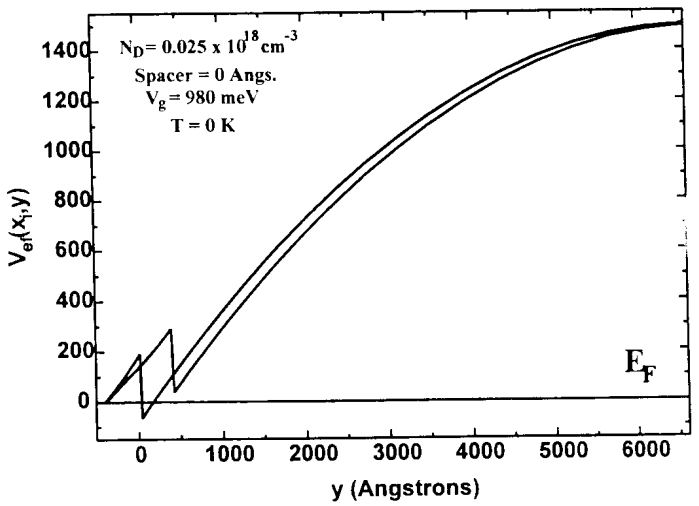


Figura 3.11: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

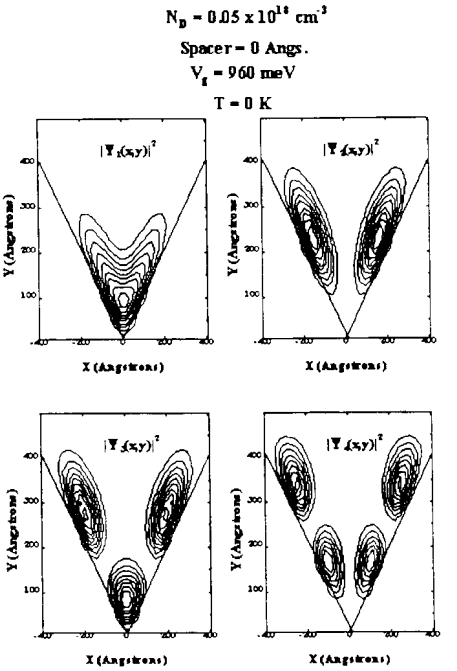


Figura 3.12: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

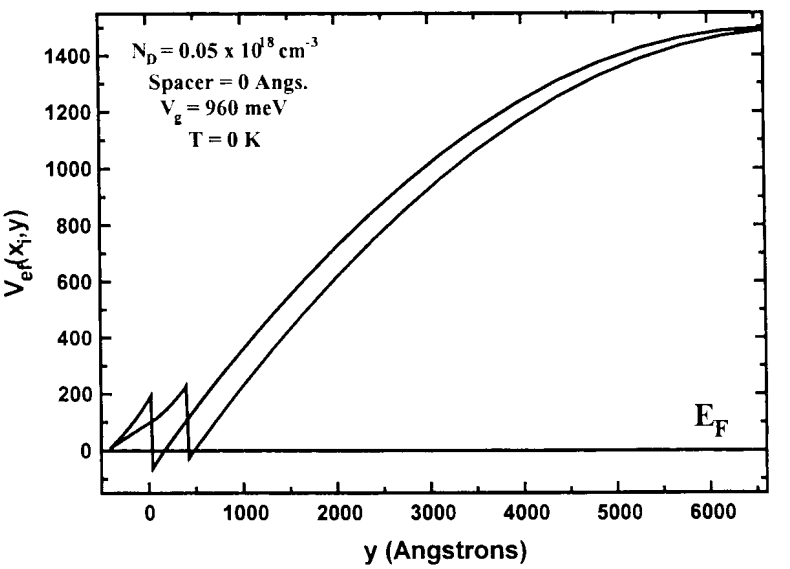


Figura 3.13: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.05 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

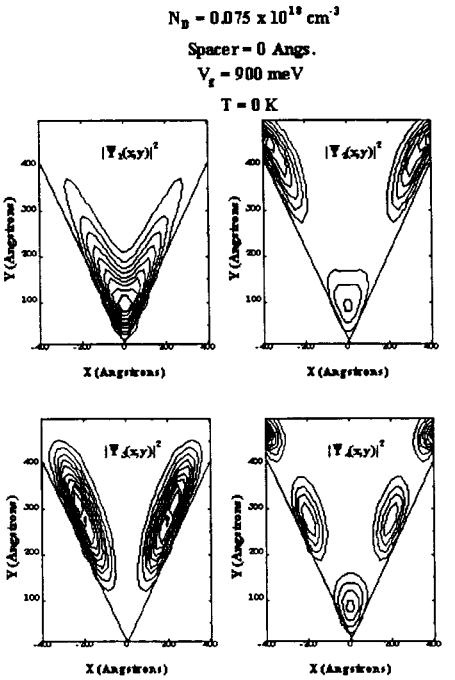


Figura 3.14: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

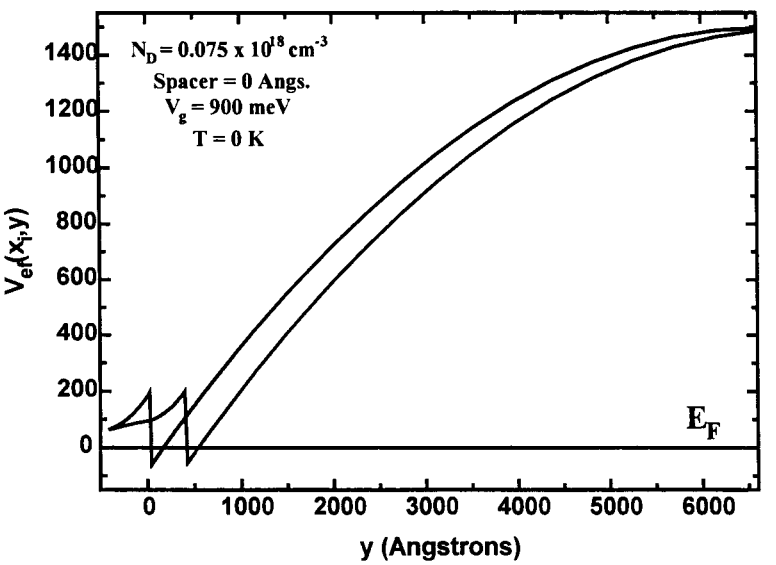


Figura 3.15: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

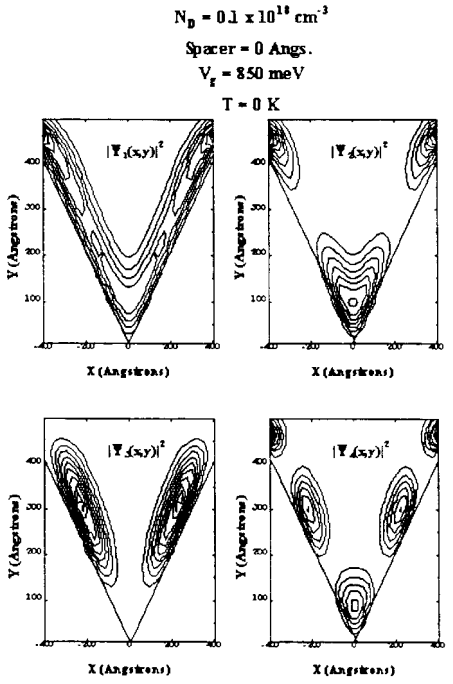


Figura 3.16: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

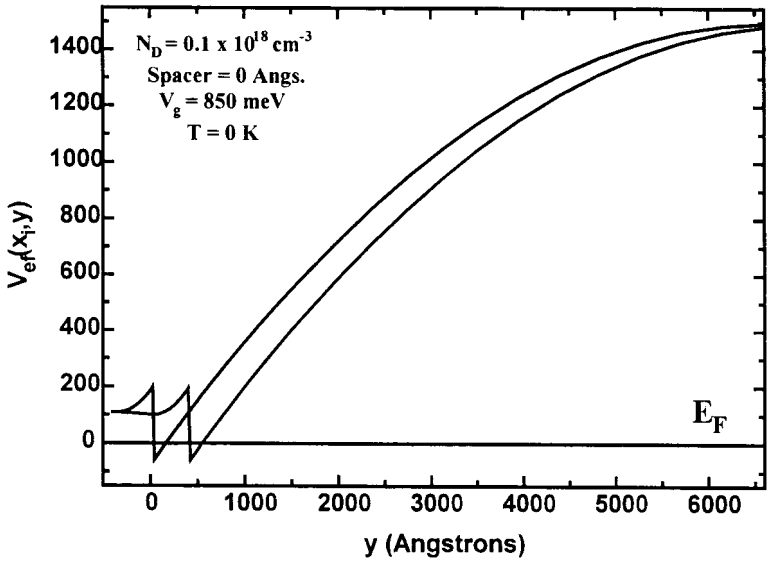


Figura 3.17: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.01 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

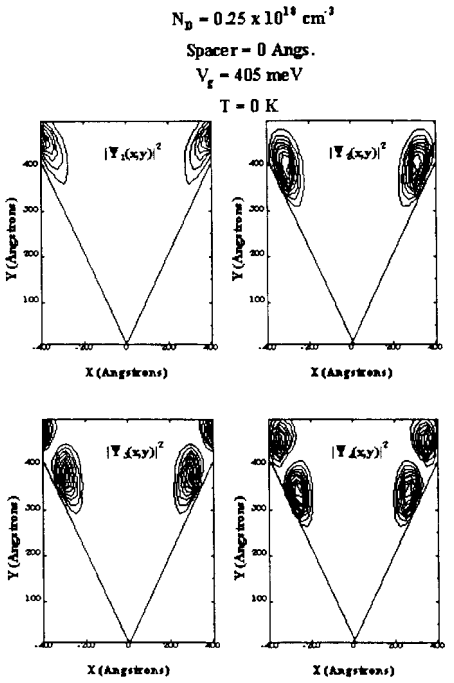


Figura 3.18: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

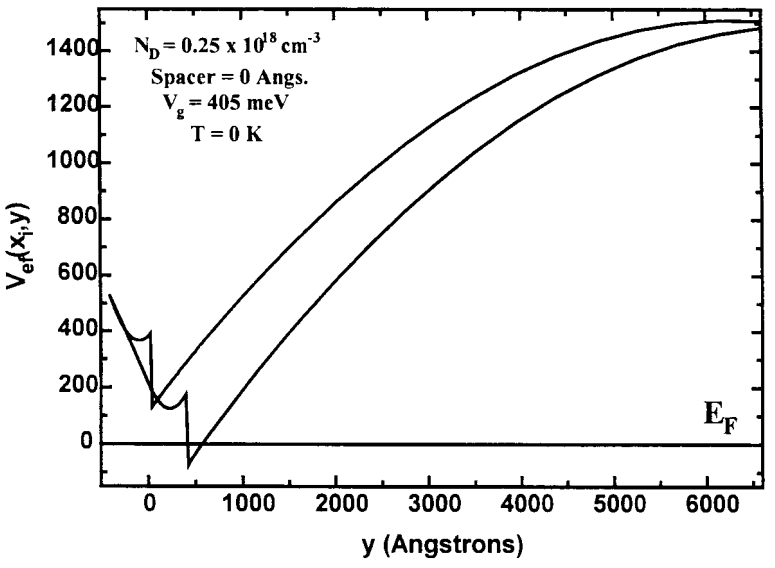


Figura 3.19: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

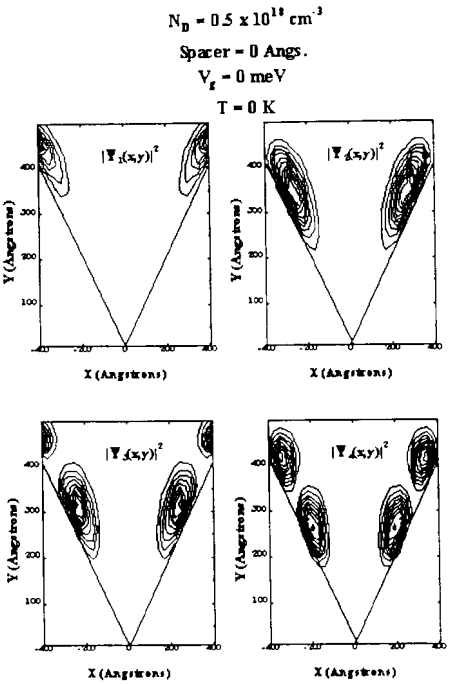


Figura 3.20: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.5 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

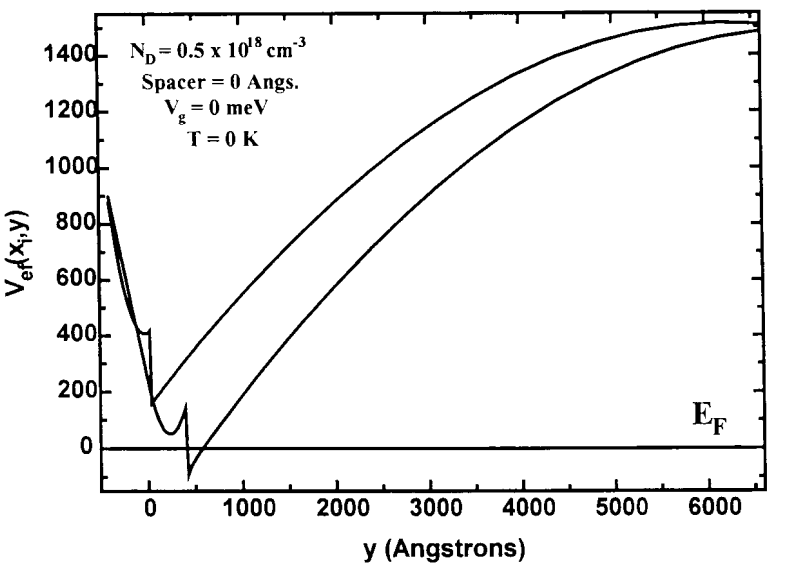


Figura 3.21: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.5 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

3.4 Efeitos do "Spacer "

Agora iremos avaliar o efeito de uma camada espaçadora (*spacer*) sobre a forma e a região do confinamento do gás de elétrons.. Para isto iremos considerar uma camada espaçadora de 50 Å ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As$), e uma camada de $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ dopada com impurezas doadoras de 350 Å, na qual iremos variar a concentração de impurezas doadoras.

Na tabela 3.2, apresentamos os níveis de energia com suas respectivas ocupações, para cada densidade de impurezas doadoras. Novamente controlamos a voltagem aplicada ao *gate* para que somente o estado fundamental do sistema fosse populado. O comportamento do espaçamento de energia entre as sub-bandas se manteve, ou seja, a medida que aumentamos a densidade de impurezas doadoras o espaçamento em energia entre as diversas sub-bandas vai diminuindo e posteriormente ele começa a aumentar. Por exemplo, para $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} temos que a energia do estado fundamental dos dois sistemas estão bem próximas, enquanto o espaçamento em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado dos dois sistema diminuiu. Para $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}, temos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava do $GaAs$, enquanto que para $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} o gás de elétrons está completamente estendido sobre o sistema. Ao fazermos esta mesma comparação para as densidades $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.25 \times 10^{18}$ cm^{-3} encontramos que os níveis de energia estão próximos e que a separação em energia entre as duas primeiras sub-bandas dos dois sistemas sofreu um acréscimo.

Na figura 3.22 apresentamos as curvas de níveis da densidade de probabilidade $|\Psi_i(x,y)|^2$, na qual vemos a formação de um gás de elétrons quase-1D na região côncava do $GaAs$, com um raio médio da ordem de 100 Å estando bem localizado nesta região. Já na figura ??, apresentamos duas seções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.025 \times 10^{18}$

Tabela 3.2: Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura zero e um *spacer* de 50 Å.

Temperatura = 0 e Spacer = 50 Å					
N_D ($\times 10^{18}$ cm^{-3})	V_g (meV)	E_1 (meV)	E_2 (meV)	E_3 (meV)	E_4 (meV)
0.075	910	-0.0133	13.8185	17.0233	28.0408
Ocupação		0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
0.1	880	-0.1176	2.1487	5.1765	11.7853
Ocupação		0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
0.15	760	-0.0344	8.5109	17.1163	26.2734
Ocupação		0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
0.2	630	-0.0430	14.3196	27.5485	40.5284
Ocupação		0.0001	.0000	0.0000	0.0000
0.25	480	-0.0396	25.3097	33.8643	56.6863
Ocupação		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.5	0.0	-3.4496	6.3854	21.5778	36.5459
Ocupação		0.0009	0.0000	0.0000	0.0000

cm^{-3}, a qual nos mostra uma diferença de 100 meV em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å na interface entre o $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e o $GaAs$.

Na seqüência de figuras de 3.22 à ??, podemos verificar uma mudança na forma e na região do confinamento do gás de elétrons. Para baixas densidades o sistema passa a apresentar um gás de elétrons quase-1D confinado na região côncava do $GaAs$ como mostra as curvas de níveis das densidade de probabilidade $|\Psi_i(x,y)|^2$. Existe um intervalo intermediário de densidade de impurezas doadoras no qual o gás de elétrons fica completamente estendido sobre todo o sistema. Já para densidades um pouco maiores o sistema passa a apresentar um gás de elétrons quase-1D confinado na região convexa do $GaAs$, em vez da região côncava. Ao compararmos estes estados com os obtidos para um sistema sem spacer, vemos que não houve nenhuma mudança significativa no comportamento geral do sistema.

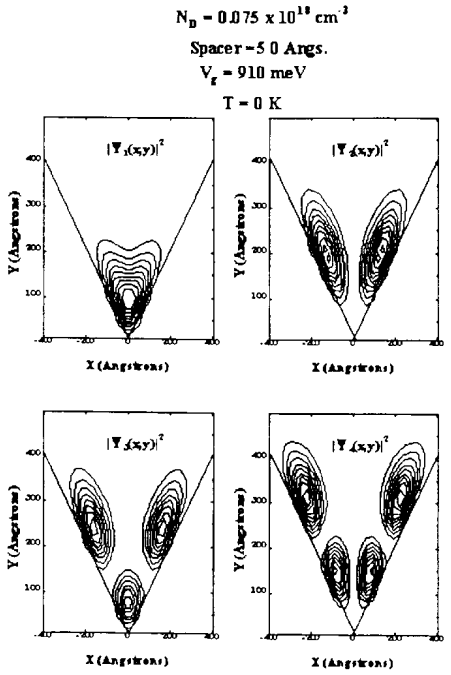


Figura 3.22: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

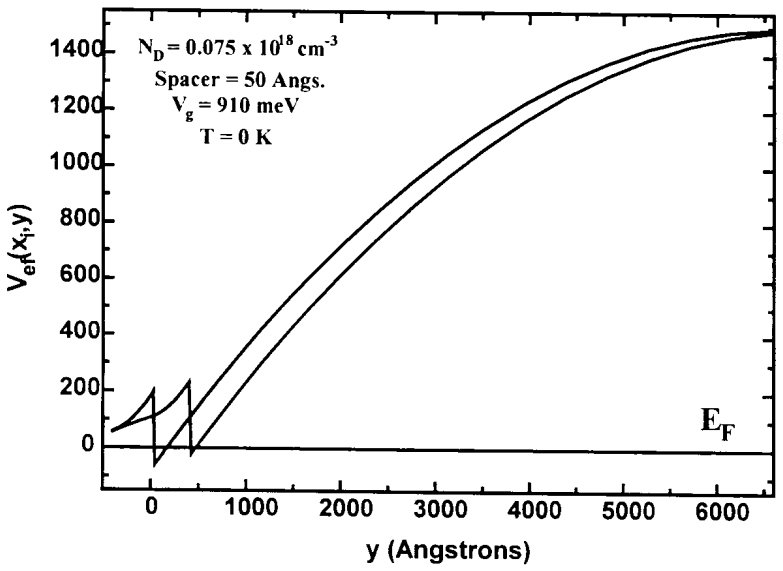


Figura 3.23: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

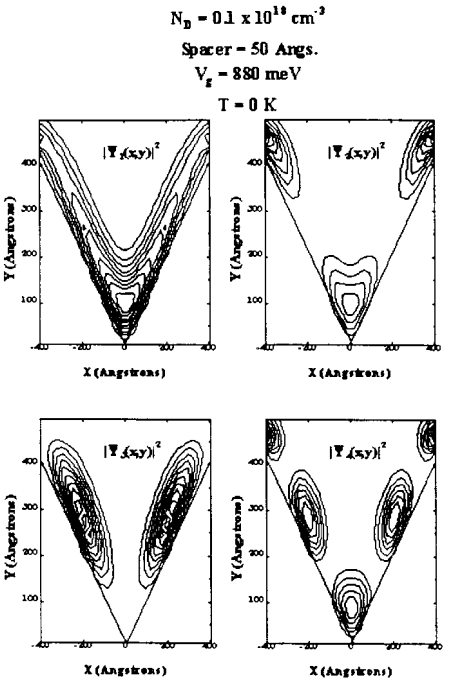


Figura 3.24: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

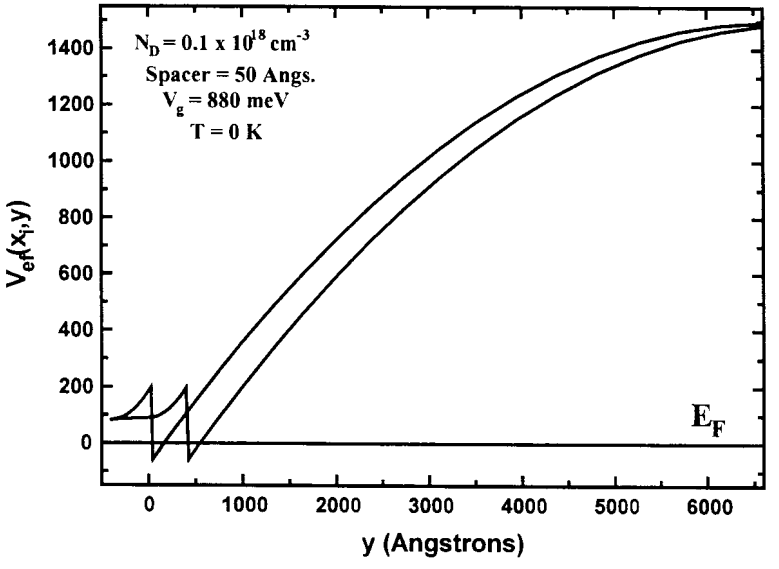


Figura 3.25: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

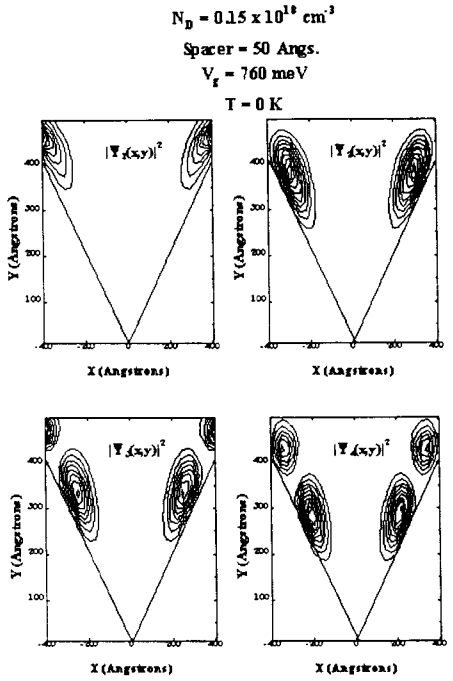


Figura 3.26: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro p
da heteroestrutura corrugada, com $T = 0$, e $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

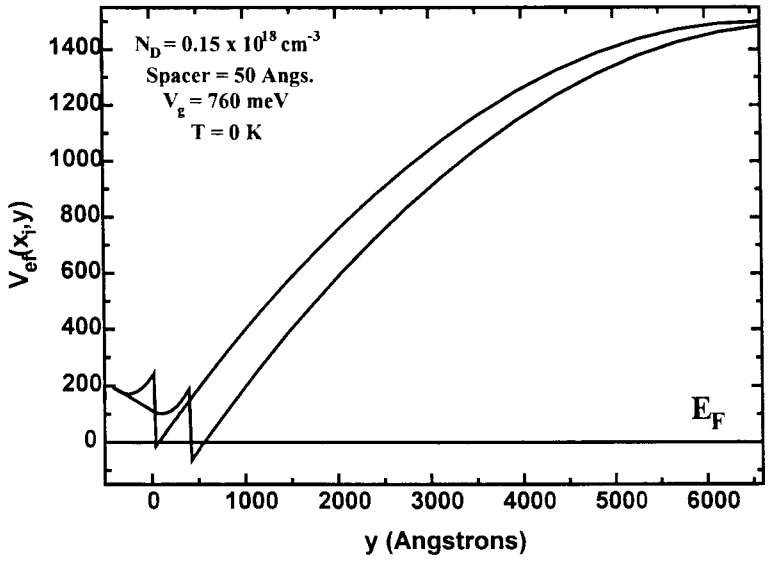


Figura 3.27: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 0 K e $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

3.5 Efeitos da Temperatura

Nesta seção iremos apresentar os resultados obtidos quando investigamos esta heteroestrutura corrugada (figura 3.7) com os seguintes parâmetros: uma temperatura de 4 K, um spacer de 0 Å e largura da camada de impurezas doadoras de 400 Å. A voltagem aplicada ao *gate* novamente foi usada para mantermos somente o estado fundamental do sistema populado. Verificamos que basicamente o efeito da temperatura é popular os níveis de energia próximos do nível de Fermi.

Na tabela 3.3, apresentamos os níveis de energia com suas respectivas ocupações, para cada densidade de impurezas doadoras. Novamente controlamos a voltagem aplicada ao *gate* para garantir que iremos popular somente o estado fundamental do sistema. O comportamento do espaçamento de energia entre as sub-bandas se manteve, ou seja, a medida que aumentamos a densidade de impurezas doadoras o espaçamento em energia entre as diversas sub-bandas vai diminuindo e posteriormente ele começa a aumentar. Por exemplo, para $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} temos que o espaçamento em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado dos dois sistema diminuiu. Para $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}, temos a formação de um gás de elétrons estendido sobre todo o sistema, mas com um pequeno confinamento na região côncava do $GaAs$ como podemos ver nas figuras 3.28 e 3.29, enquanto que para $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} o gás de elétrons está completamente estendido sobre o sistema. Ao fazermos está mesma comparação para as densidades $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $N_D = 0.15 \times 10^{18}$ cm^{-3} encontramos que os níveis de energia estão próximos e que a separação em energia entre as duas primeiras sub-bandas dos dois sistemas sofreu um acréscimo.

Na seqüência de figuras de 3.28 à 3.31, mostramos uma mudança lenta na forma do confinamento do gás de elétrons. Novamente vimos que realmente o fator mais importante para a formação de um gás de elétrons nesta heteroestrutura é a densidade de impurezas

Tabela 3.3: Energias e ocupação dos quatro primeiros níveis de eneriga do sistema corrugado para uma temperatura 4 K e um *spacer* de 0 Å.

Temperatura = 4 e Spacer = 0 Å					
N_D ($\times 10^{18}$ cm^{-3})	V_g (meV)	E_1 (meV)	E_2 (meV)	E_3 (meV)	E_4 (meV)
0.075	940	-2.1355	0.2428	2.8173	9.6465
Ocupação		0.0007	0.0001	0.0000	0.0000
0.1	855	-0.8035	1.1030	4.1320	11.2375
Ocupação		0.0004	0.0000	0.0000	0.0000
0.15	730	-0.8313	3.4960	8.8818	15.6815
Ocupação		0.0004	0.0000	0.0000	0.0000
0.2	630	-2.4920	1.7350	7.8327	15.2737
Ocupação		0.0007	0.0000	0.0000	0.0000
0.25	490	-2.7191	3.0631	12.3636	23.2268
Ocupação		0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
0.5	0.0	-11.0103	-4.8453	2.5848	12.6520
Ocupação		0.0016	0.0010	0.0000	0.0000

doadoras, os outros parâmetros tem alguma influência quando também estão associados a uma variação da densidade de impurezas doadoras.

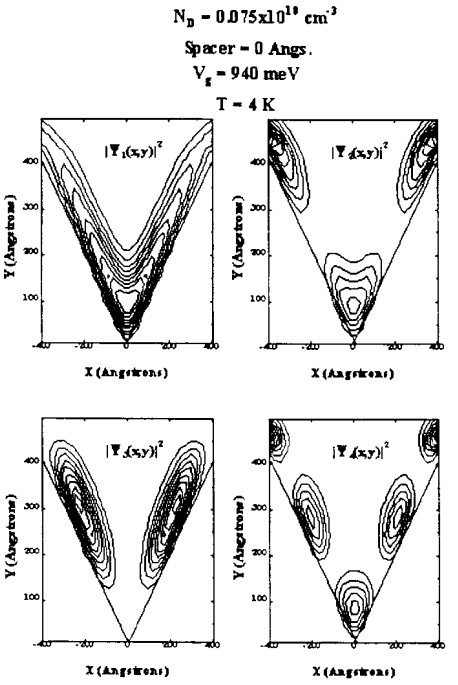


Figura 3.28: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 4$, e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

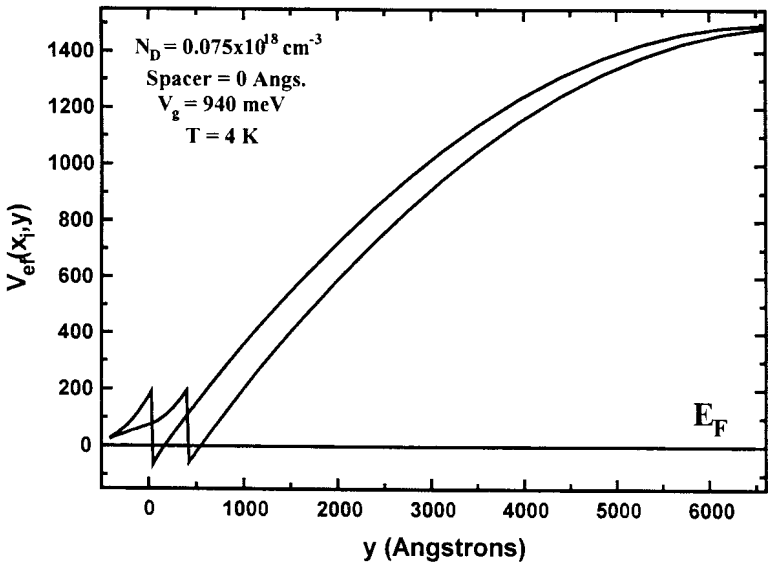


Figura 3.29: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 4 K e $N_D = 0.075 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

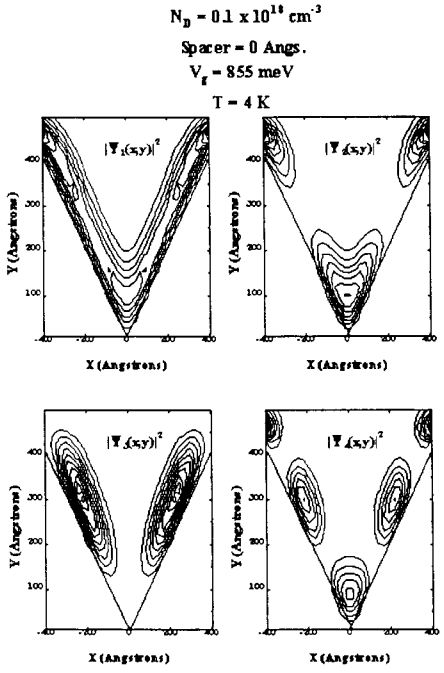


Figura 3.30: Curvas de níveis das densidades de probabilidades dos quatro primeiros estados da heteroestrutura corrugada, com $T = 4$, e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

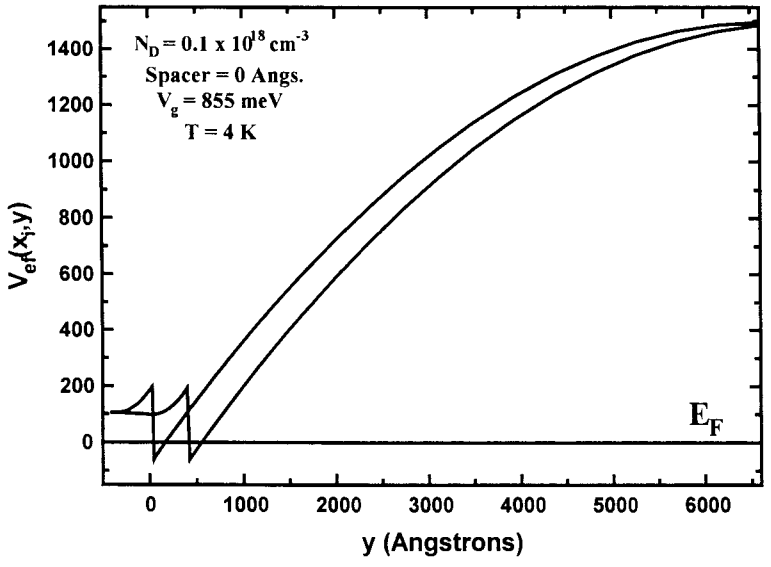


Figura 3.31: Secções transversais do potencial ao longo da direção y, com cortes em $x = 0$ Å e $x = 400$ Å, para uma temperatura 4 K e $N_D = 0.1 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

3.6 Conclusões

Neste capítulo, estudamos a formação de um gás de elétrons quase-1D, em fios quânticos do tipo *V-groove*, e mostramos que este gás de elétrons quase-1D pode se formar na região côncava ou convexa do $GaAs$. Utilizamos a voltagem aplicada ao *gate* para controlarmos a população das sub-bandas do sistema. Mostramos que a densidade de impurezas doadoras tem um papel determinante sobre qual região irá ocorrer o confinamento do gás de elétrons quase-1D. Variando a voltagem e a densidade de impurezas doadoras, encontramos estados estendidos sobre todo o sistema, os quais apresentam características dos sistemas quase-2D. A primeira característica está no fato da densidade de probabilidade estar estendida sobre todo o sistema e a segunda está na diminuição dos espaçamentos em energia entre as sub-bandas.

Capítulo 4

Fios Quânticos por Confinamento Eletrostático

Neste capítulo iremos investigar a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D, em uma heteroestrutura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, na qual temos no topo desta uma estrutura *gates* metálicos, e na interface entre o $Al_xGa_{1-x}As$ e o $GaAs$ temos a formação de um gás de elétrons quase-2D. Ao aplicarmos um voltagem negativa aos *gates*, induzimos a formação de canais quase-1D nas regiões entre os *gates*, cujo o potencial de confinamento é controlado pela voltagem aplicada aos *gates*. Verificamos esta transição através do cálculo das densidades de probabilidades $|\Psi(x,y)|^2$, das relações de dispersão, da condutância e da capacitância. Os resultados que obtivemos foram para uma temperatura de 4 K.

4.1 Introdução

Como os sistemas eletrônicos quase-2D (2DEG) são facilmente obtidos na direção de crescimento por técnicas de MBE ou MOCVD, uma maneira óbvia de se obter sistemas eletrônicos quase-1D (fios quânticos) ou quase-0D (pontos quânticos) é fazermos um ataque químico (*etching*) combinado com técnicas de nanolitografia a uma heteroestrutura 2DEG padronizada. Os limites dos processos de litografia estão bem na região em que aparecem os efeitos quânticos, com o presente estado da arte o padrão de transferência

litográfica está no intervalo de 10 nm. A maior vantagem deste tipo de procedimento está na sua grande aplicabilidade a qualquer espécie de semicondutor, e a sua flexibilidade em definir heteroestruturas (fios e pontos quânticos) com diferentes formas geométricas. Por outro lado, a desvantagem básica é devido aos danos que a corrosão (*etching*) causa nas superfícies livres, o que normalmente provoca a degradação das paredes laterais dos fios e pontos quânticos, com a conseqüente deterioração de suas propriedades ópticas. A definição da difração nas máscaras é limitada e a corrosão (*etching*) induz danos limitando a aplicabilidade destes métodos a nanoestruturas de tamanhos laterais da ordem de 40 nm [8, 9].

Os danos introduzidos pelo procedimento de corrosão química (*etching*) usado na transferência de padrões para estruturas semicondutoras, tornam-se relevantes quando as dimensões destes padrões são pequenas (da ordem de 40nm), pois nesta situação eles passam a dominar as propriedades eletrônicas destas estruturas. Um dos efeitos dos danos da corrosão mais verificados, é a depressão dos portadores para concentrações padrões, a qual se estende sobre 50 nm (ver [3, 8] e referências lá contidas). Atualmente os materiais baseados em $GaInAs$ são menos sensíveis a este efeito. Uma outra evidência dos danos está no decréscimo da eficiência da luminescência devido aos numerosos defeitos não radiativos. O recrescimento sobre estruturas corroídas parece reparar parcialmente somente alguns dos danos.

Para obtermos estruturas com menos danos, técnicas de fabricação mais suaves vêem sendo pesquisadas (ver fig. 4.1 abaixo). Umas poucas tem se mostrado usuais, embora apresentem uma resolução geométrica mais baixa do que as heteroestruturas obtidas diretamente por corrosão (ver fig. 4.2):

1. Corrosão parcial do topo do material de confinamento fornecendo um potencial de confinamento lateral devido aos diferentes potenciais eletrostático nas zonas de

depleção.

2. *Gates* também podem ser depositados sobre estas camadas de padrão de confinamento para obtermos um controle sobre a densidade eletrônica.

3. Aplicando camadas metálicas sobre as camadas de resiste padronizadas induziremos também um potencial periódico sobre um gás de elétrons 2D como o potencial Schottky da superfície.

4. Eletrodos *split-gate* fornecem um poço de potencial abaixo do eletrodo controlado pela voltagem. Estas estruturas são muito usadas em emissores de contato pontual para transporte longitudinal e como poços de potenciais controlados para transporte lateral.

Estas estruturas semicondutoras do tipo *split-gate* têm um potencial de confinamento eletrostático cuja a grande vantagem está no fato dele poder ser controlado pela voltagem aplicada aos *gates*, mas elas são mais complexas para se fabricar e operar.

4.2 Sistema Investigado

Neste capítulo a estrutura que iremos estudar é constituída por uma super-rede de fios quânticos em heterojunções de $GaAs$–$Al_{1-x}Ga_xAs$. Esta heterojunção é formada por uma camada de $GaAs$, seguida de uma de $Al_xGa_{1-x}As$, e posteriormente por uma camada de $Al_xGa_{1-x}As$ dopada com impurezas doadoras. Os elétrons das impurezas doadoras migram para a interface do $GaAs$ com o $AlxGa_{1-x}As$ não dopado, formando um gás de elétrons bidimensional. A largura da camada de $Al_xGa_{1-x}As$ não dopada, conhecida como *spacer*, é tipicamente da ordem de 80 Å.

Se o *spacer*, for muito pequeno, os elétrons que estão na interface passam a sentir a presença das impurezas ionizadas, sendo espalhados por estas, ou seja, teríamos

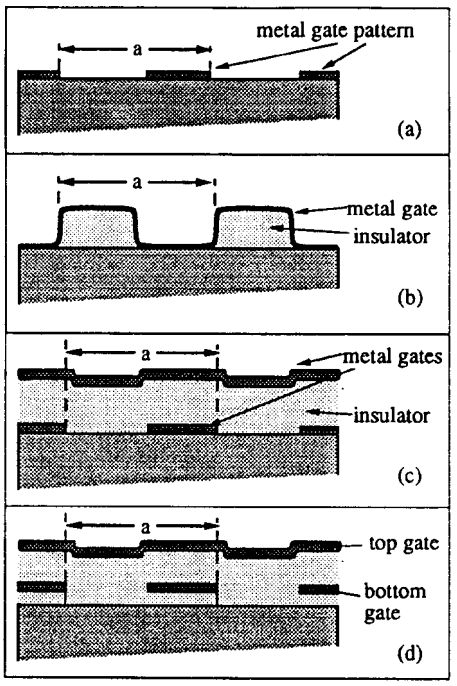


Figura 4.1: Diferentes configurações de "*gate*" que são usadas para impor gradientes de potencial lateral a um 2DEG [3].

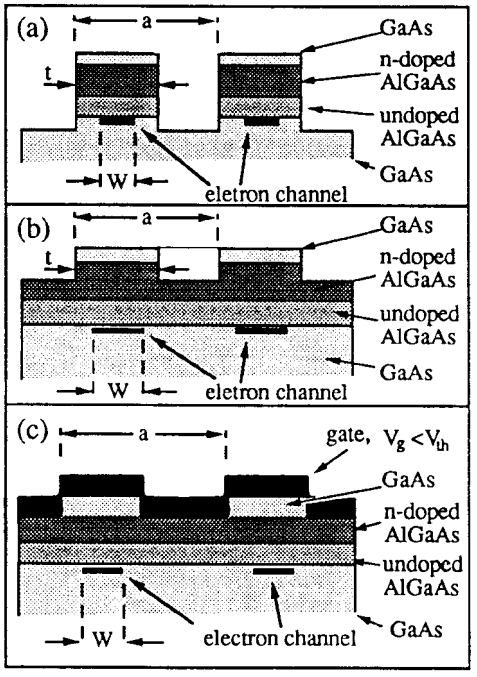


Figura 4.2: Seções transversais de heterojunções de $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ obtidas através de processos de corrosão (*etching*) [3].

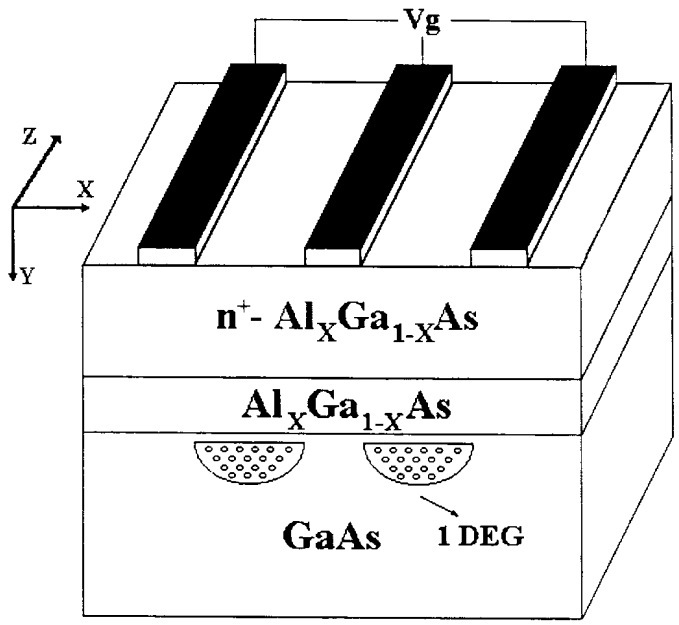


Figura 4.3: Representação de fios quânticos cujo o confinamento em umas das direções é devido a um potencial eletrostático.

centro espalhadores, o que significaria uma sensível redução na mobilidade deste gás de elétrons. Já se esta camada for muito grande, poucos elétrons conseguirão migrar para esta interface, portanto teríamos uma baixa concentração de portadores. Esta camada é tipicamente da ordem de algumas dezenas de Angstrons (geralmente entre 20 e 100 Å).

Com a formação de um gás de elétrons bidimensional na interface do $GaAs$ com o $Al_xGa_{1-x}As$ pode-se criar fios quânticos nesta interface por meio de um potencial eletrostático aplicado ao *gate*, como mostra a figura 4.3. Aplicando-se uma voltagem negativa nos gates os elétrons procuram regiões de menor energia ficando confinados nas regiões entre os gates formando nesta região um gás de elétrons unidimensional. Na figura 4.4, mostramos o perfil do potencial efetivo deste sistema, enquanto na figura 4.5 mostramos dois cortes transversais do sistema na direção y (paralela a direção de crescimento).

Os resultados que iremos apresentar neste capítulo, foram obtidos considerando-se que a distribuição residual de impurezas aceitadoras é de 5.0×10^{15} cm^{-3}, e que elas estão distribuídas uniformemente em todo o sistema. Já quanto as impurezas doadoras,

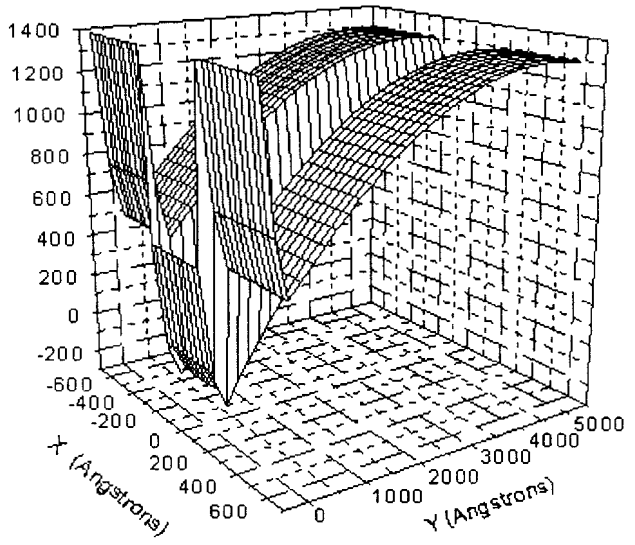


Figura 4.4: Perfil do potencial de fios quânticos cujo o confinamento em umas das direções é devido a um potencial eletrostático.

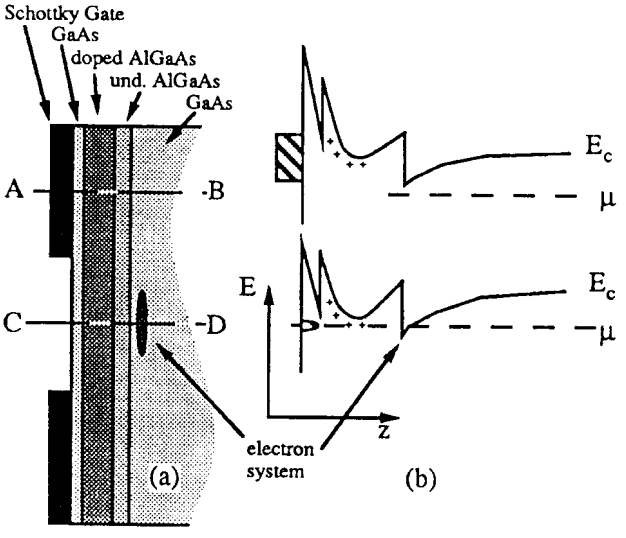


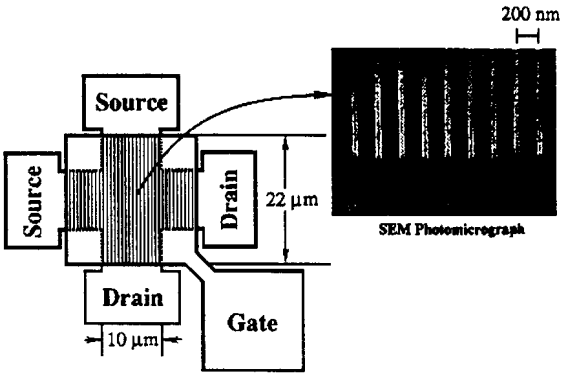
Figura 4.5: Perfil do potencial da heteroestrutura de $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$, em um corte transversal paralelo a direção de crescimento da amostra. (a) Aqui mostramos a heteroestrutura com a estrutura de *gate*, e em (b) mostramos o perfil do potencial em uma região sob o *gate* e em uma sem o *gate*.

consideramos que as mesmas estão distribuídas uniformemente em uma pequena camada cuja a largura varia entre 300 Å e 350 Å.

Esta super-rede de fios quânticos em heterojunções de $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$, cujo o potencial de confinamento em uma direção é devido a um potencial eletrostático aplicado ao *gate*, é um sistema bastante interessante tanto do ponto de vista experimental (pelas razões expostas anteriormente) quanto do ponto de vista teórico, já que ele é um sistema bastante rico. Do ponto de vista experimental ele é bastante interessante, e isto deve-se não só ao fato do gás de elétrons ser extremamente puro, mas também ao fato de que com uma única amostra, ao se variar a voltagem aplicada ao *gate*, consegue-se investigar diversos sistemas, os quais podem passar desde um gás de elétrons quase-2D, posteriormente por uma super-rede de fios quânticos até chegar a uma série de fios quânticos completamente confinados e isolados (um gás de elétrons quase-1D). Neste sistema iremos investigar a transição de dimensionalidade do gás de elétrons que está confinado na interface da heterojunção de $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$, a qual irá ocorrer ao variarmos a voltagem aplicada ao *gate*, quando ele irá passar de gás de elétrons quase-2D para um quase-1D. Está transição ocorre de uma maneira continua, havendo um intervalo de voltagem no qual o sistema apresenta ambas características.. Neste capítulo iremos investigar está transição de dimensionalidade, assim como o intervalo de voltagem no qual ela irá ocorrer. Experimentalmente esta transição foi observada por [4, 18], através de medidas da condutância ao longo da direção periódica.

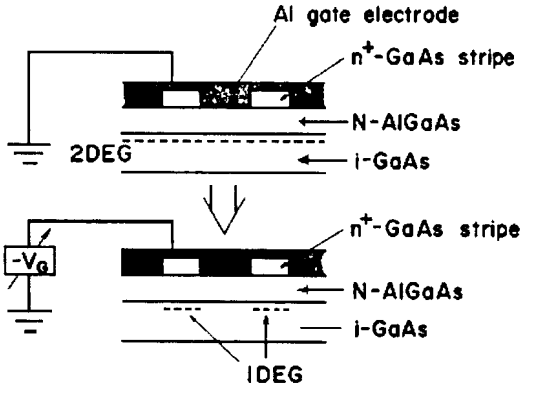
Okada et al [4] fabricaram e caracterizaram um FET de $GaAs/AlGaAs$ com dopagem modulada e com um *gate* corrugado, no qual o canal com o gás de elétrons foi mudado de um canal convencional com um gás de elétrons bidimensional para um arranjo de canais com um gás de elétrons unidimensional. As suas medidas foram feitas em uma temperatura de 5 K. Nas figuras 4.6 e 4.7, apresentamos o sistema investigado por eles.

Na estrutura investigada por eles, cada canal com um gás de elétrons quase-



Top view of the device and SEM photomicrograph of the n^+-GaAs stripes.

Figura 4.6: Visão do topo do dispositivo utilizado por Okada et al [4] para investigar a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D.



Schematic cross section of the device.

Figura 4.7: Seção transversal do dispositivo investigado por Okada et al.

1D possui uma largura de 50 nm na direção periódica e estão afastados de 200 nm uns dos outros. Nesta estrutura eles observaram que a transcondutância transversa ao FET (Ver figura 4.8) diminuía (decrescia) com o aumento da voltagem negativa (decréscimo da voltagem) e chegava a zero em uma voltagem limiar da ordem de -0.45 V. Além disso, eles observaram também que a transcondutância longitudinal ao FET tem um valor finito na voltagem limiar de -0.45 V, indicando desta forma que o canal mudou de bidimensional para unidimensional em uma voltagem da ordem de -0.45 V. Nas medidas de capacitância do *gate* realizadas, eles observaram que esta decrescia monotonicamente

no regime unidimensional de -0.45 V à -1.0 V, e este fato, sugere que a largura e a concentração linear do canal quase-unidimensional decresce monotonicamente com a variação da voltagem negativa, ou seja, ao diminuirmos a voltagem.

Com respeito a transcondutância de um FET longitudinal no regime do canal unidimensional, eles verificaram que existe uma mudança crítica na inclinação da curva da transcondutância em torno de -0.85 V, e que esta mudança crítica desaparece a temperatura ambiente.

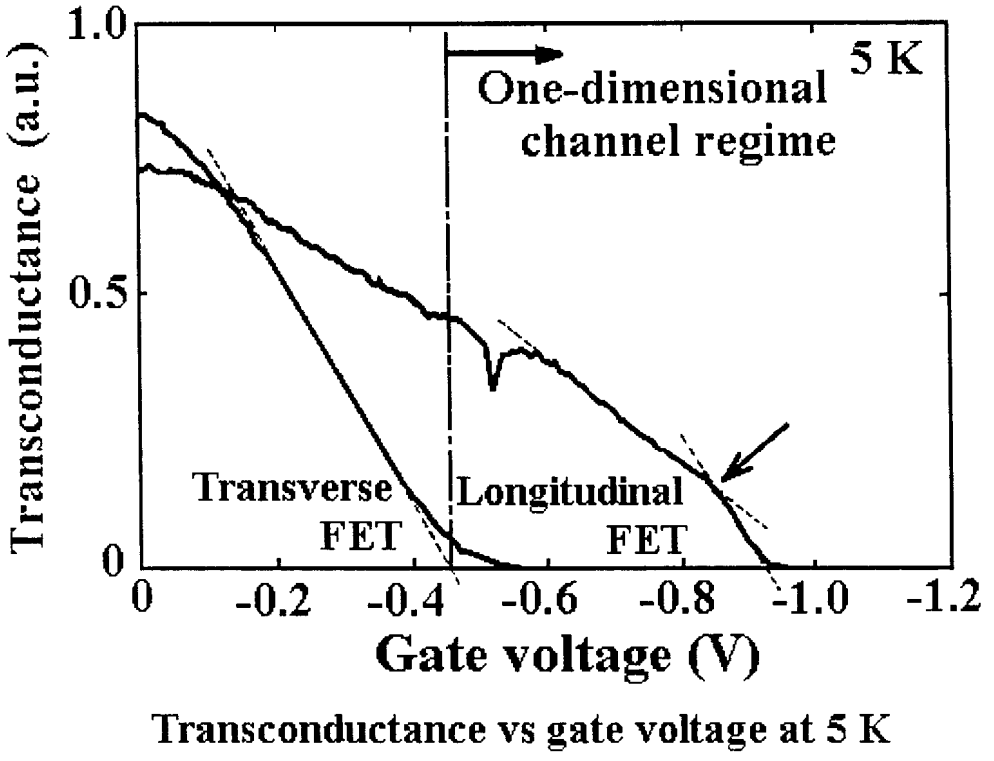
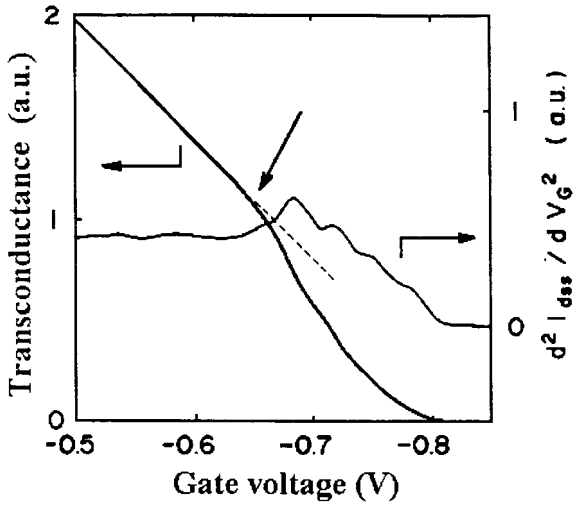
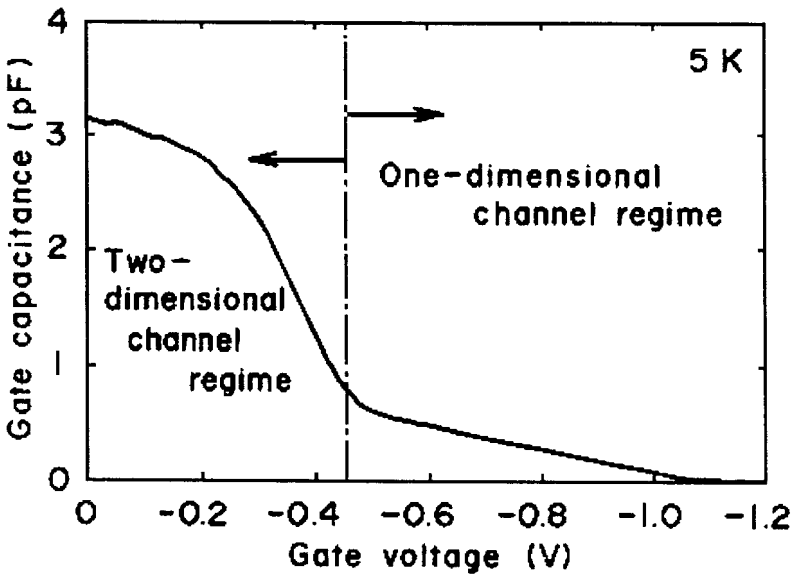


Figura 4.8: Trancondutância versus voltagem aplicada ao gate. Resultado experimental obtido por Okada et al. [4]



Transconductance vs gate voltage at 5 K, and second derivative for drain current vs gate voltage at 5 K.

Figura 4.9: Transcondutância versus voltagem aplicada ao gate, e a derivada segunda da corrente de dreno versus voltagem aplicada ao gate. Resultados experimentais obtidos por Okada et al. [4]



Gate capacitance vs gate voltage at 5 K.

Figura 4.10: Capacitância versus voltagem aplicada ao gate. Resultado experimental obtido por Okada et al. [4]

4.3 Estados Eletrônicos para $T = 0$ K

Nesta seção apresentaremos os resultados para os estados eletrônicos do sistema apresentado na figura 4.3 para duas diferentes densidades de impurezas doadoras. Inicialmente iremos considerar uma dopagem de impurezas doadoras de $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3}, distribuída uniformemente sobre uma camada de 350 Å de largura. A largura do "*spacer*", camada de $Al_xGa_{1-x}As$ não dopado, é de 50 Å. Os resultados a seguir foram obtidos para uma temperatura de 0 K e uma densidade residual de impurezas aceitadoras de $N_A = 5.0 \times 10^{15}$ cm^{-3} distribuída uniformemente sobre todo o sistema.

Como as nossas condições de contorno na direção x são periódicas, então para obtermos um gás de elétrons quase-1D completamente confinado, devemos impor que a penetração da função de onda na barreira de potencial (região imediatamente abaixo do *gate*) seja pequena comparada com a sua largura. Levando isto em conta, nossos resultados foram obtidos considerando que a largura do *gate* é de 800 Å (tamanho na direção x), enquanto o tamanho do fio (canal do gás de elétrons quase-1D) é de 400 Å , ou seja, $L_x = 400$ Å .

4.3.1 Estudo do Confinamento para $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3}

Para esta densidade investigamos os efeitos devido ao potencial, ou seja, para duas diferentes voltagens aplicadas aos *gates*. Para um potencial de 300 mV aplicado aos gates, verificamos que o sistema ainda apresenta um caráter bidimensional como é mostrado pelo comportamento da relação de dispersão do sistema para esta voltagem (figura 4.12), e também pelo comportamento das funções de onda (figura 4.11), principalmente a do estado fundamental a qual ainda esta estendida sobre o sistema. Para esta voltagem aplicada aos *gates* vemos da relação de dispersão que o sistema ainda está fortemente acoplado, pois mesmo o estado fundamental do sistema esta interagindo com os outros fios. A relação de dispersão ainda apresenta um comportamento parabólico característico

do sistema livre, ou seja, sem um potencial de confinamento ($V_g = 0$ mV).

Já para uma voltagem de 600 mV aplicada ao gate (figura 4.14) podemos ver porque o sistema é interessante do ponto de vista experimental, já que mudando somente a voltagem aplicada ao gate podemos mudar completamente o comportamento do sistema. Esta mudança de comportamento na sua relação de dispersão (figura 4.14) se reflete nas suas propriedades ópticas e de transporte. Da relação de dispersão para esta voltagem (figura 4.14) vemos que ela é praticamente linear para o estado fundamental, indicando o caráter quase-1D deste sistema. Quanto ao segundo estado deste sistema podemos ver da relação de dispersão que ele apresenta uma pequena dispersão, a qual pode ser vista na sua função de onda (figura 4.13). Quanto aos outros estados podemos ver pelo comportamento da sua dispersão que eles possuem um caráter bidimensional, ou seja, eles estão interagindo com os fios que estão ao seu lado, mas eles não definem o comportamento do sistema já que não estão populados.

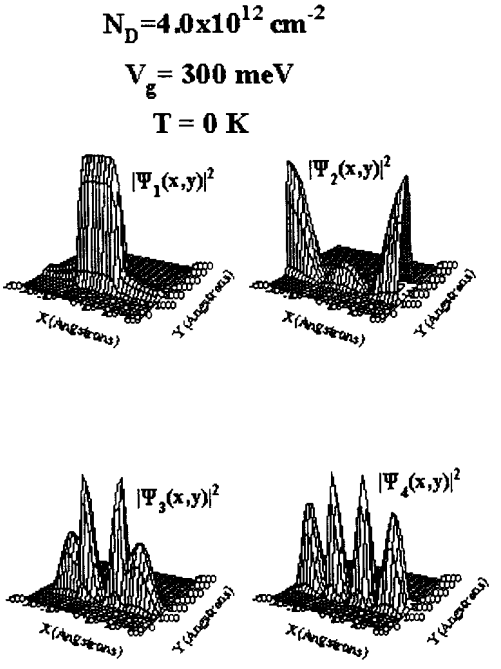


Figura 4.11: Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 300$ mV.

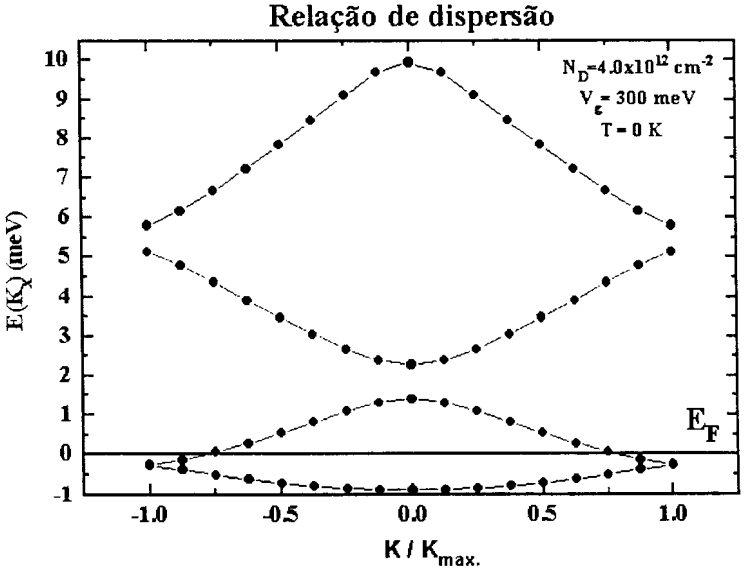


Figura 4.12: Relação de dispersão para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $V_g = 300$ meV.

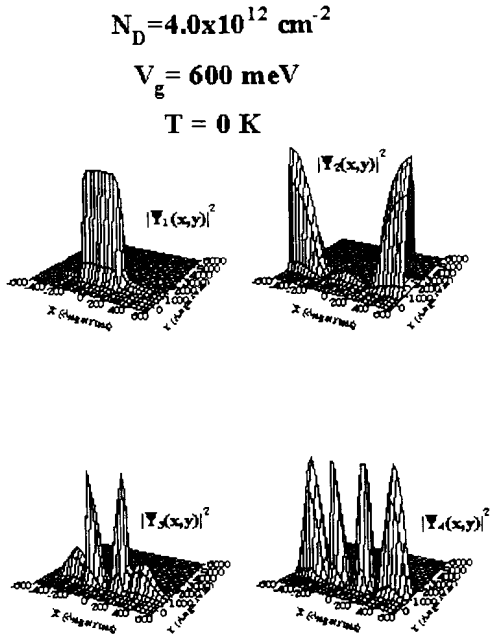


Figura 4.13: Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 600$ mV.

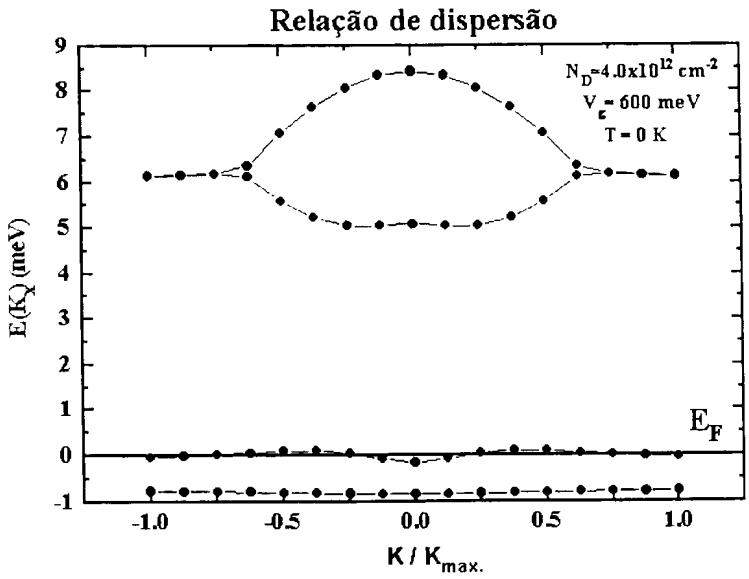


Figura 4.14: Relação de dispersão para $T = 0$ K, $N_d = 4.0 \times 10^{18}$ cm^{-3} e $V_g = 600$ meV.

4.3.2 Estudo do Confinamento para $N_d = 4.5 \times 10^{18}$ cm^{-3}

Agora iremos investigar o caso em que a densidade de impurezas doadoras da estrutura apresentada na figura 4.3 é de $N_D = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2}. Nos resultados que apresentaremos a seguir, foram obtidos utilizando-se os seguintes parâmetros: uma densidade de impurezas doadoras de $N_D = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} distribuída uniformemente sobre uma camada de $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de 350 Å, uma densidade residual de impurezas aceitadoras de $N_A = 5.0 \times 10^{15}$ cm^{-3} distribuída uniformemente sobre todo o sistema, um *spacer* de 50 Å, uma distância entre os *gates* de 400 Å (tamanho lateral do fio quântico), a largura dos *gates* é de 800 Å e uma temperatura zero.

Para um potencial de 300 mV aplicado aos gates, ver[illegible] sistema apresenta um caráter bidimensional como é mostrado pelo comportamento da sua relação de dispersão do sistema para esta voltagem (ver Fig. 4.15), ou ainda pelo comportamento de sua função de onda para os diversos $\vec{k}$ (ver figura 4.16). Para esta voltagem aplicada ao gate vemos da relação de dispersão que o sistema ainda está fortemente acoplado, pois mesmo o estado fundamental do sistema esta interagindo com os outros fios. Já para um potencial de 600 mV aplicado aos gates, verificamos que o sistema apresenta um caráter unidimensional como é mostrado pelo comportamento praticamente linear da relação de dispersão do estado fundamental (figura 4.15), ou ainda pelo comportamento de suas funções de onda (figura 4.17), principalmente a do estado fundamental a qual esta confinada na região entre os *gates*.

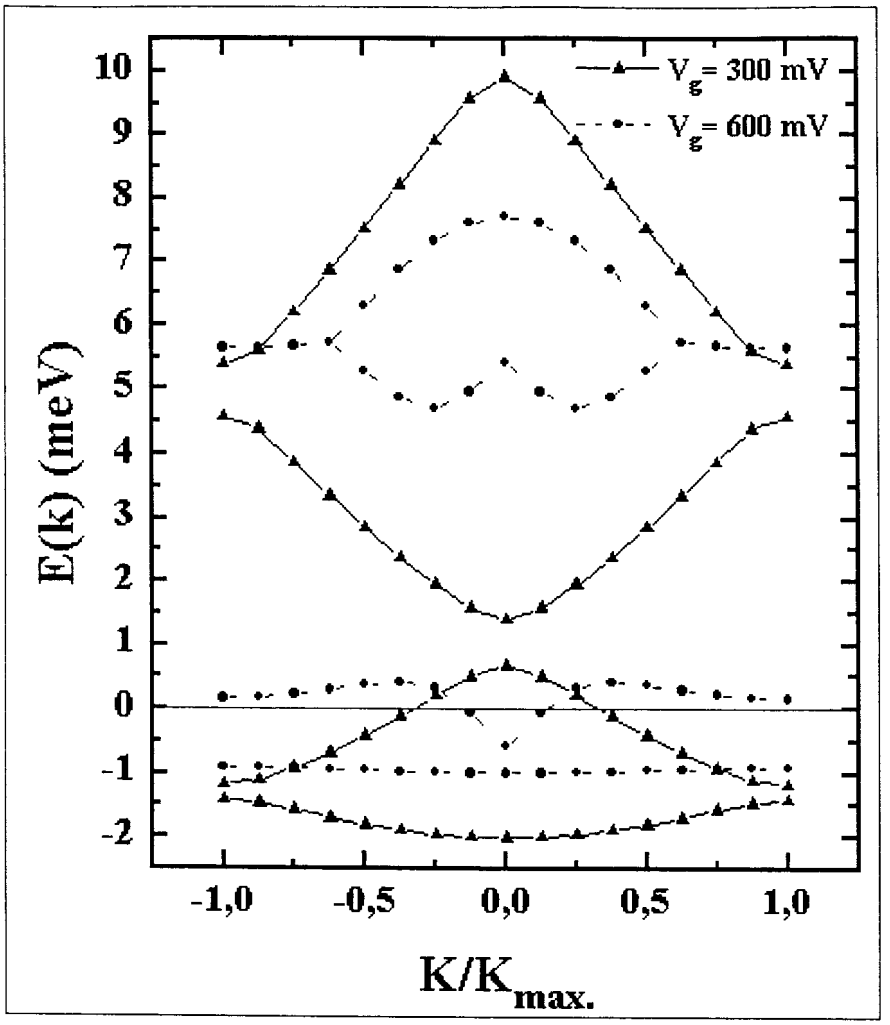


Figura 4.15: Relação de dispersão para duas diferentes voltagens aplicadas ao gate.

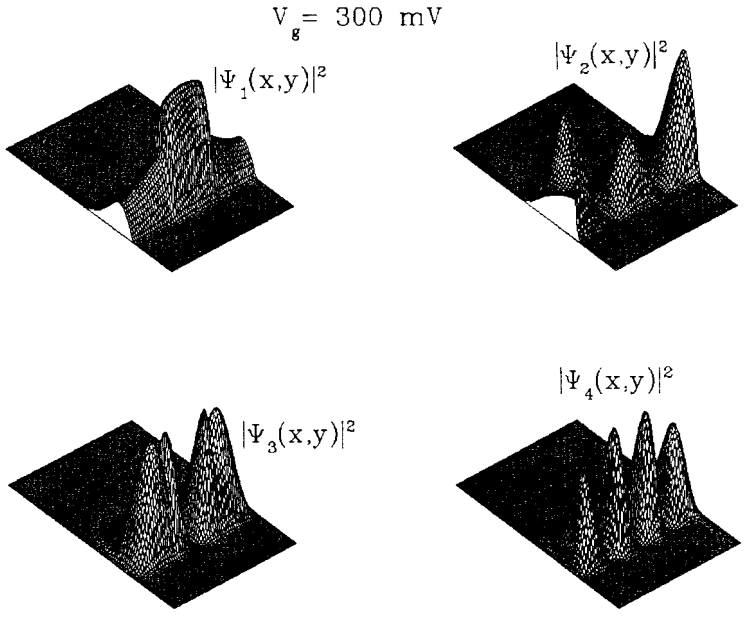


Figura 4.16: Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 300$ mV

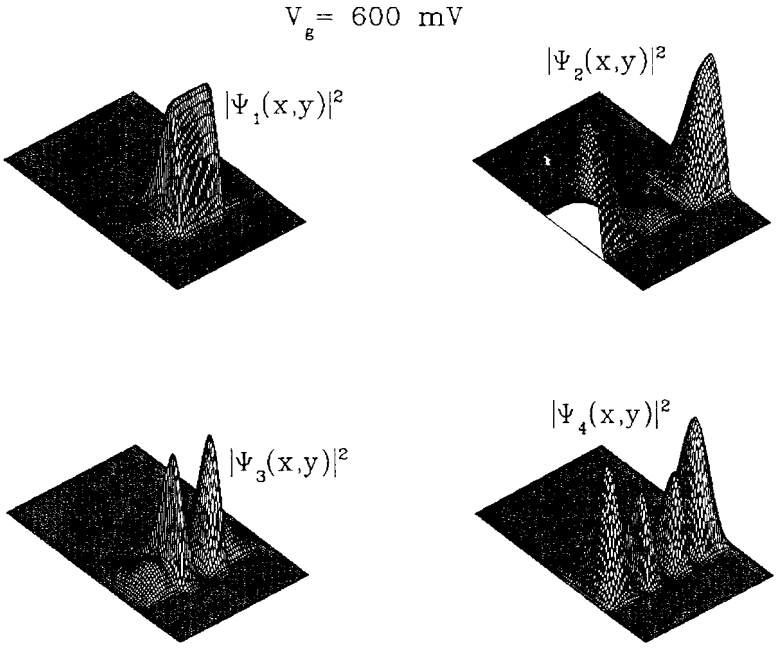


Figura 4.17: Funções de onda em $k_x = 0$, para $T = 0$ K, $N_d = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} e $V_g = 600$ mV

4.4 Transição de um Sistema Quase-2D para um Quase-1D

Nesta seção investigaremos a transição de um gás de elétrons quase-2D para um gás de elétrons quase-1D, em função da voltagem aplicada aos *gates*. Os resultados que iremos apresentar nesta seção se referem a estrutura apresentada na figura 4.3, e os parâmetros utilizados foram os seguintes: uma densidade de impurezas doadoras de $N_D = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2} distribuída uniformemente sobre uma camada de $n - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de 350 Å, uma densidade residual de impurezas aceitadoras de $N_A = 5.0 \times 10^{15}$ cm^{-3} distribuída uniformemente sobre todo o sistema, um *spacer* de 50 Å, uma distância entre os *gates* de 400 Å (tamanho lateral do fio quântico), a largura dos *gates* é de 800 Å e uma temperatura de 4 K. Na tabela 4.1 abaixo mostramos as energias e a população dos quatro primeiros níveis de energia em $k_x = 0$, para diferentes voltagens aplicadas ao *gate*.

Tabela 4.1: Energias e população dos quatro primeiros níveis de energia em $k_x = 0$, para uma temperatura 4 K e um *spacer* de 50 Å.

$N_D = 4.5 \times 10^{12}$ cm^{-2}; Temperatura = 4 K e Spacer = 50 Å					
	V_g (mV)	**E_1 (meV)**	**E_2 (meV)**	**E_3 (meV)**	**E_4 (meV)**
	0.0	-1.860977	1.185097	1.389457	10.34193
População		0.00164	0.00002	0.00001	0.00000
	100	-1.551317	1.556643	1.614421	10.48138
População		0.00149	0.00001	0.00001	0.00000
	200	-1.210008	1.570844	2.136789	10.61896
População		0.00128	0.00001	0.00000	0.00000
	300	-0.7401829	1.163743	2.913058	10.56472
População		0.00096	0.00002	0.00000	0.00000
	400	-0.3966212	0.8042826	7.748846	7.748882
População		0.00069	0.00006	0.00000	0.00000
	500	-0.3451211	11.99650	34.47954	71.37720
População		0.00064	0.00000	0.00000	0.00000
	600	-0.3346216	13.15707	36.38385	74.83471
População		0.00064	0.00000	0.00000	0.00000

Agora iremos apresentar as densidades de probabilidades $|\Psi_{i,k_x}(x,y)|^2$ em $k_x = 0$, e a relação de dispersão de cada sistema, para podermos identificar onde ocorrerá a transição de um sistema quase-2D para um quase-1D. Nas figuras de 4.18 à 4.43, mostramos como as densidades de probabilidades, as relações de dispersão e os perfis de potencial nas direções x e y, evoluem quando aumentamos gradativamente a voltagem aplicada aos gates.

Quando a voltagem aplicada aos *gates* é zero, temos que o sistema está livre na direção x, o que pode ser visto nas densidades de probabilidades mostradas na figura 4.18 e na sua relação de dispersão (figura 4.19). A densidade de probabilidade do estado fundamental está completamente estendida sobre todo o sistema, mostrando que o gás de elétrons é quase-2D. Já a sua relação de dispersão mostra que não há confinamento na direção x, pois ela é completamente parabólica e não apresenta *gaps* entre as sub-bandas. Na bordas as dispersões de cada sub-banda estão sendo simplesmente rebatidas, ou seja, $-K \rightarrow K$.

Para uma voltagem de 100 mV ($V_g = 100$ mV), vemos da figura 4.20 que a densidade de probabilidade do estado fundamental ainda está estendida sobre todo o sistema. A figura 4.21 da relação de dispersão apresenta um *gap* mais evidente somente entre a terceira e quarta sub-banda, mas todas as sub-bandas ainda apresenta um comportamento parabólico. Na figura 4.23 temos o perfil de potencial na direção x, o qual nos mostra que esta voltagem aplicada aos *gates* criou somente um pequena perturbação ao potencial na direção x.

Para as voltagens de 200 e 300 mV, vemos das relações de dispersão (figuras 4.25 e 4.29) que o sistema simplesmente está aumentando o *gap* entre as sub-bandas, mas estas ainda apresentam um comportamento parabólico, e que as densidades de probabilidade (figuras 4.24 e 4.28) ainda estão estendidas sobre todo o sistema. Já para uma voltagem de 400 mV aplicada aos *gates*, a densidade de probabilidade do estado fundamental

(figura 4.32) está confinada enquanto a dos outros estados ainda apresentam um caráter estendido.

Para um voltagem aplicada aos gates de 500 mV, a figura 4.36 nos mostra que o sistema já está completamente confinado e isto pode ser verificado pelo relação de dispersão (figura 4.37) a qual está completamente plana e linear em todas as sub-bandas. Desta forma podemos dizer que para $V_g = 500$ mV o sistema é um gás de elétrons quase-1D, ou seja, é nesta voltagem é que houve a transição de um sistema quase-2D para um quase-1D.

Ao acompanharmos a evolução das densidades de probabilidades e das relações de dispersão, pode-se notar que para voltagens acima de 500 mV as densidades de probabilidades estão completamente localizadas comportando-se como um sistema quase-1D, o que é confirmado pelo comportamento linear da relação de dispersão em todas as sub-bandas.

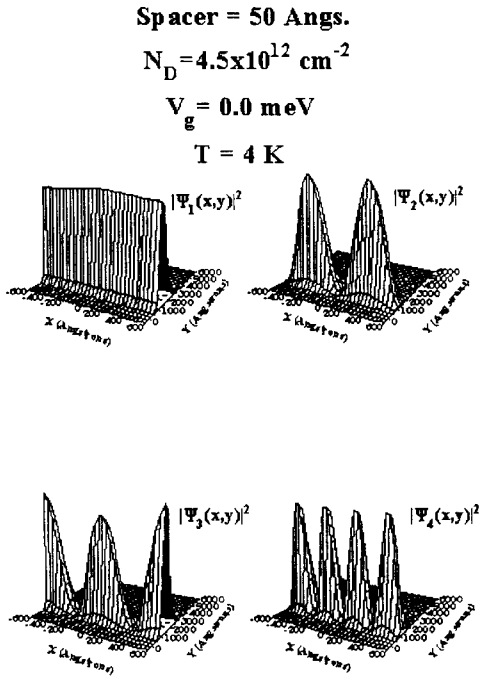


Figura 4.18: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 0.0$ mv.

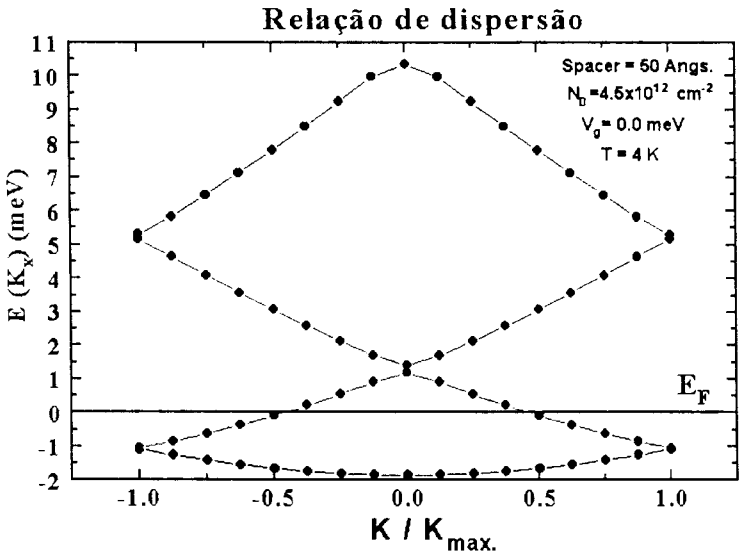


Figura 4.19: Relação de dispersão para $V_g = 0.0$ mv.

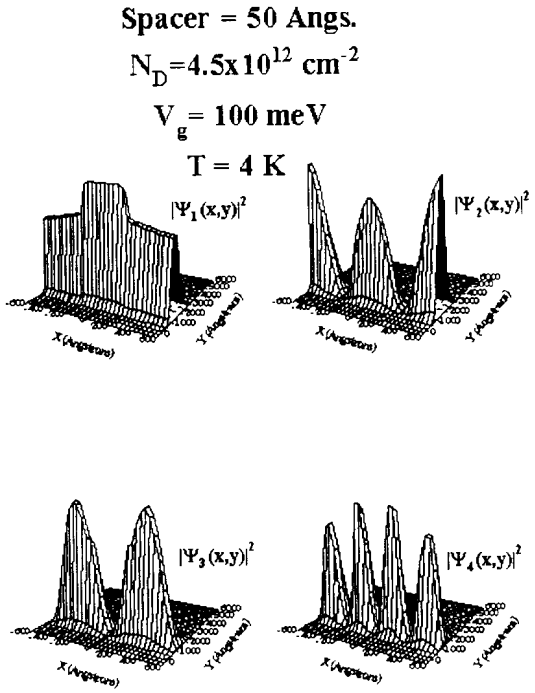


Figura 4.20: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 100$ mv.

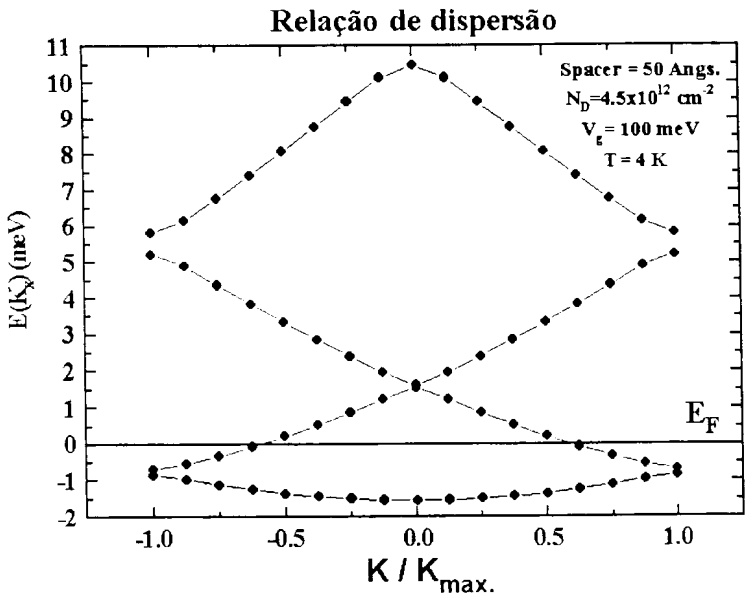


Figura 4.21: Relação de dispersão para $V_g = 100$ mv.

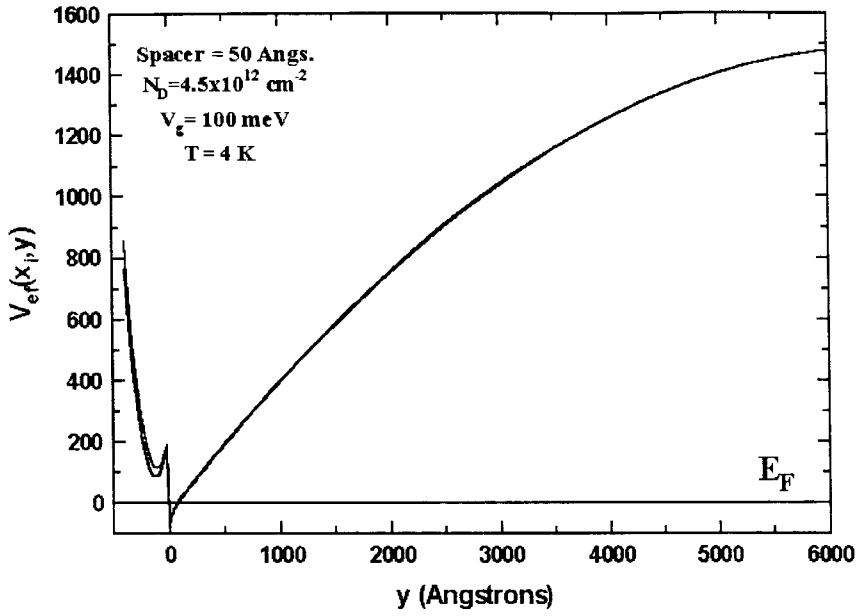


Figura 4.22: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois pl
passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. V_g =

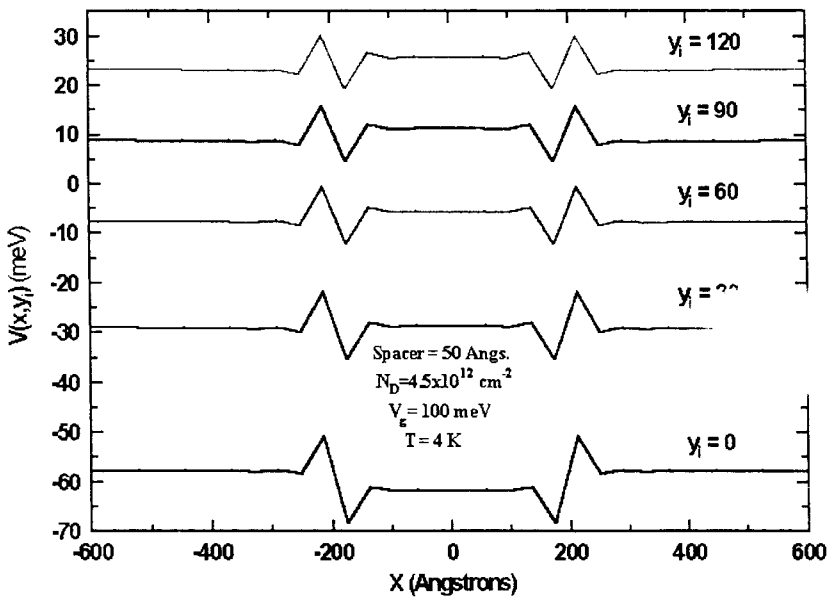


Figura 4.23: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 100$ mV.

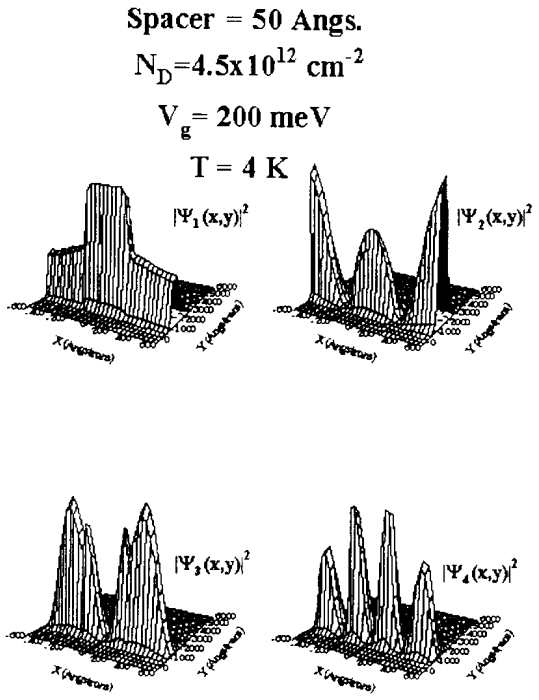


Figura 4.24: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 200$ mv.

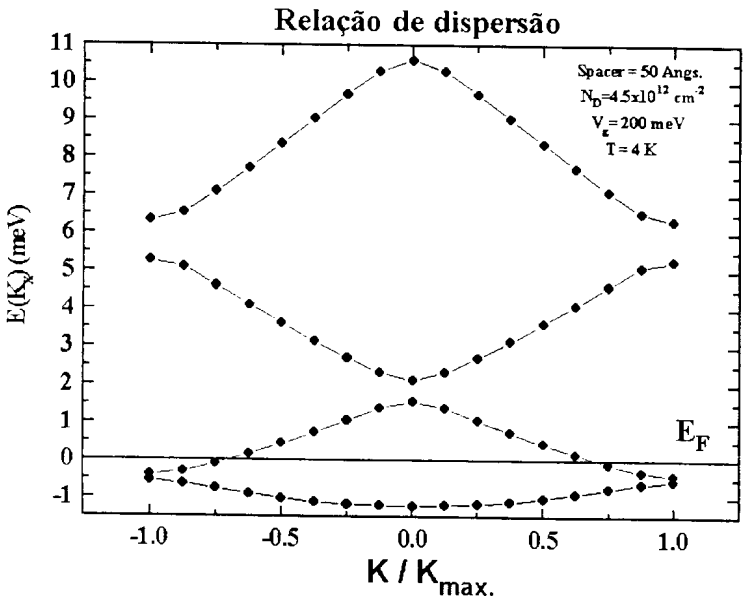


Figura 4.25: Relação de dispersão para $V_g = 200$ mv.

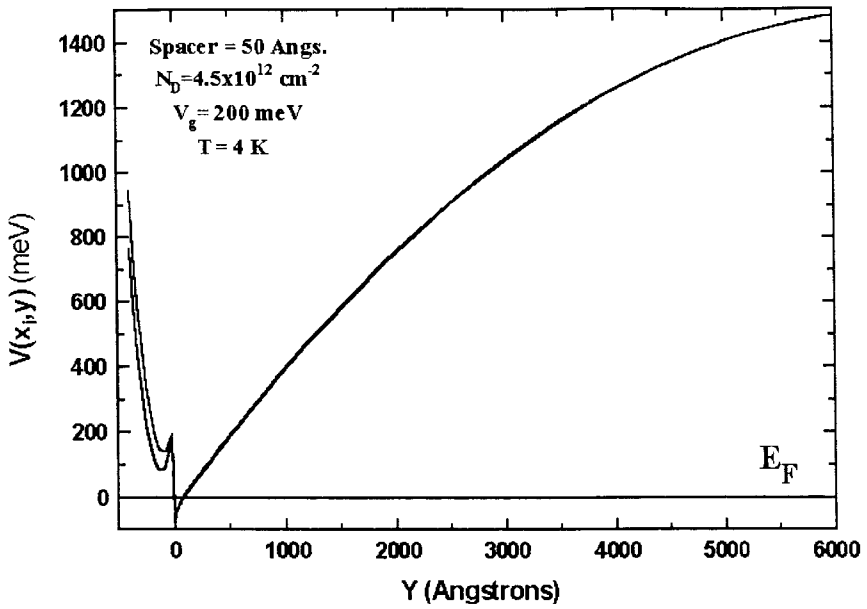


Figura 4.26: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 200$ mV.

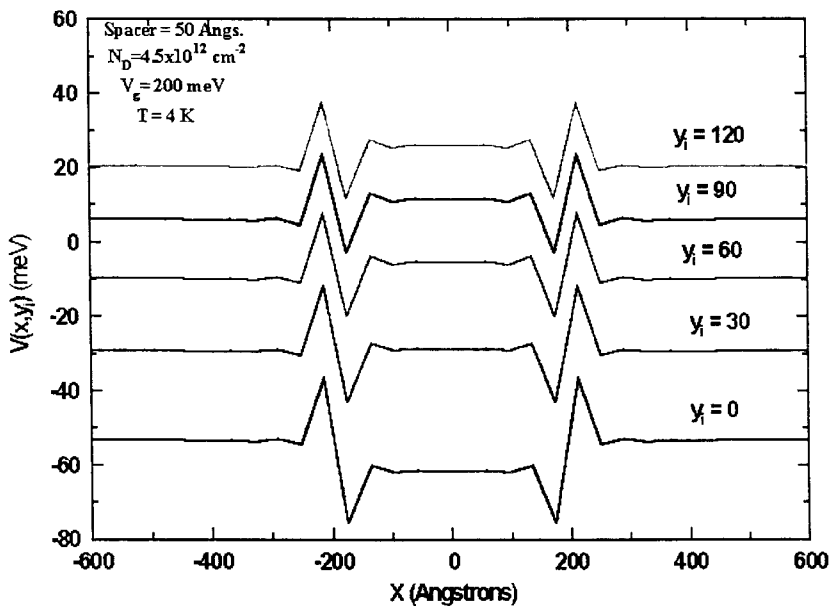


Figura 4.27: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 200$ mV.

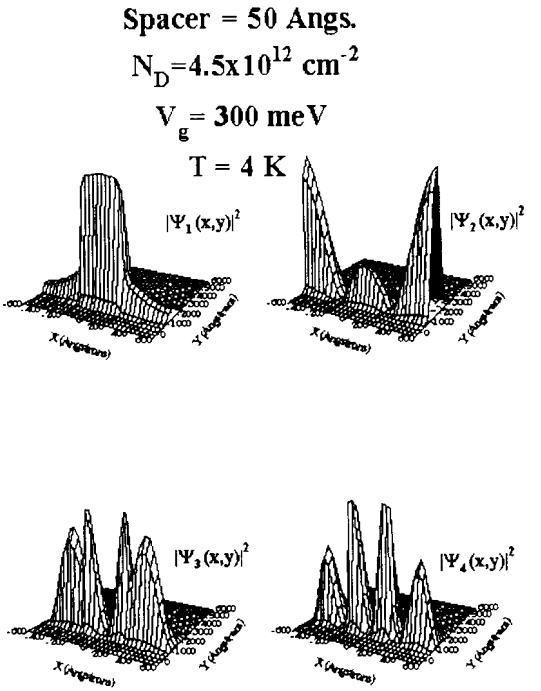


Figura 4.28: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 300$ mv.

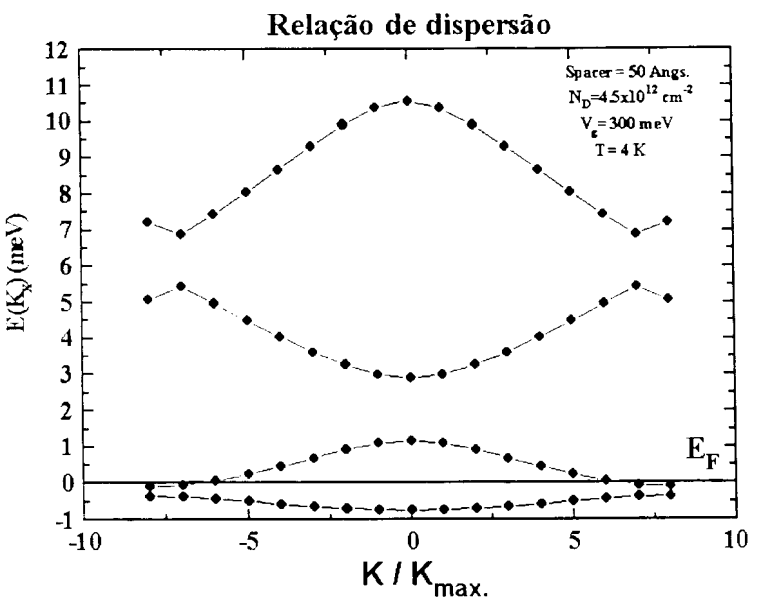


Figura 4.29: Relação de dispersão para $V_g = 300$ mv.

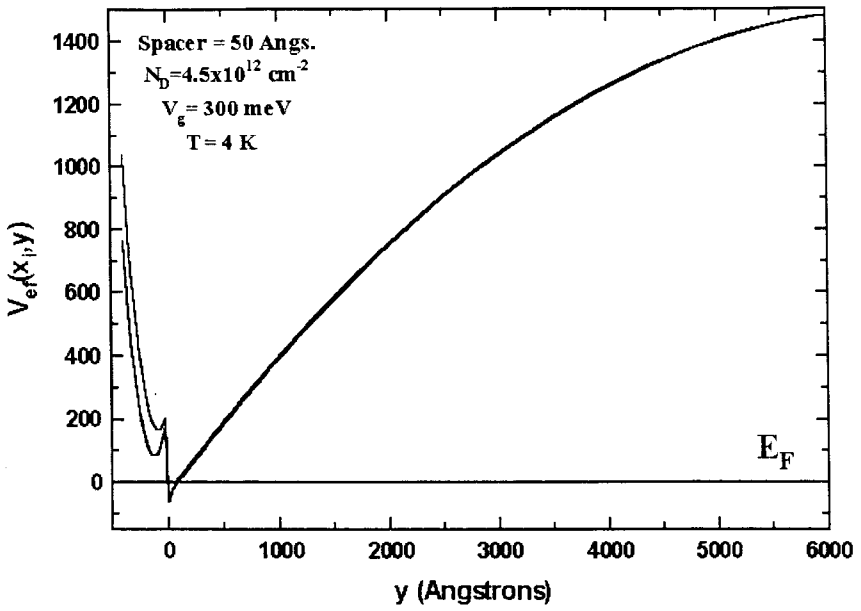


Figura 4.30: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 300$ mV.

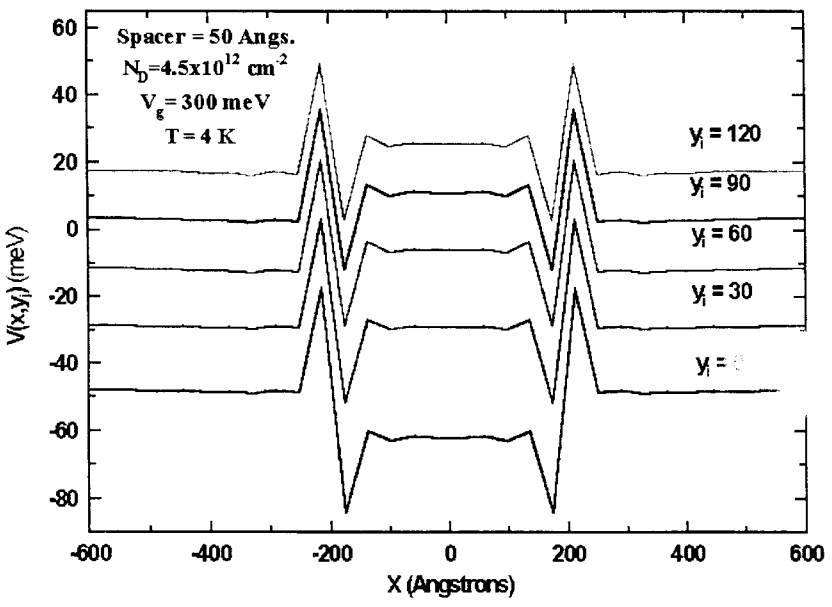


Figura 4.31: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 300$ mV.

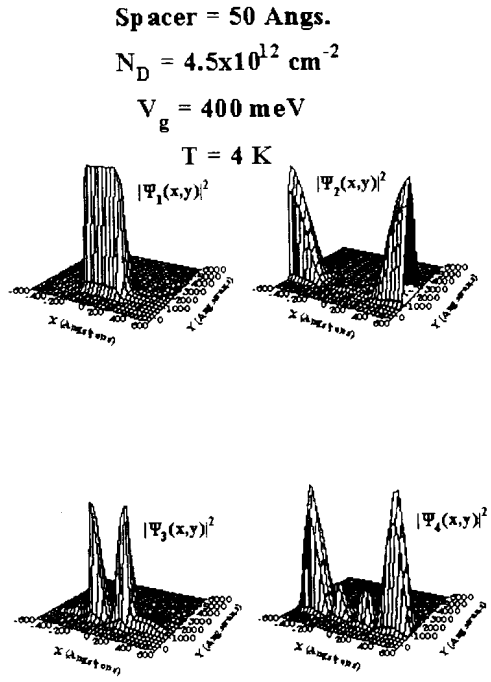


Figura 4.32: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 400$ mv.

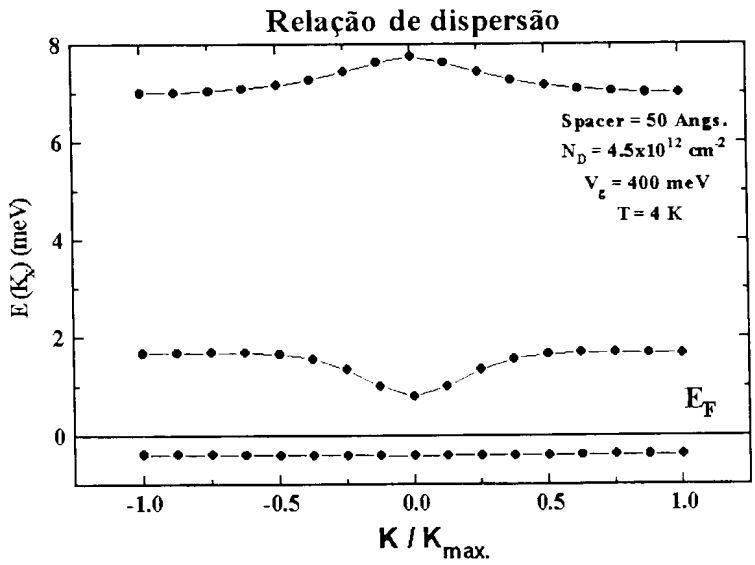


Figura 4.33: Relação de dispersão para $V_g = 400$ mv.

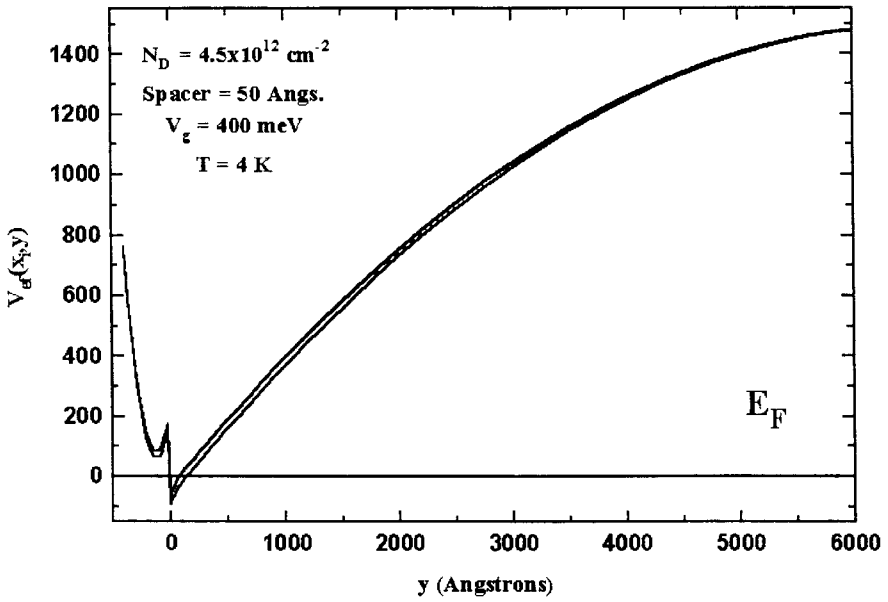


Figura 4.34: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 400$ mV.

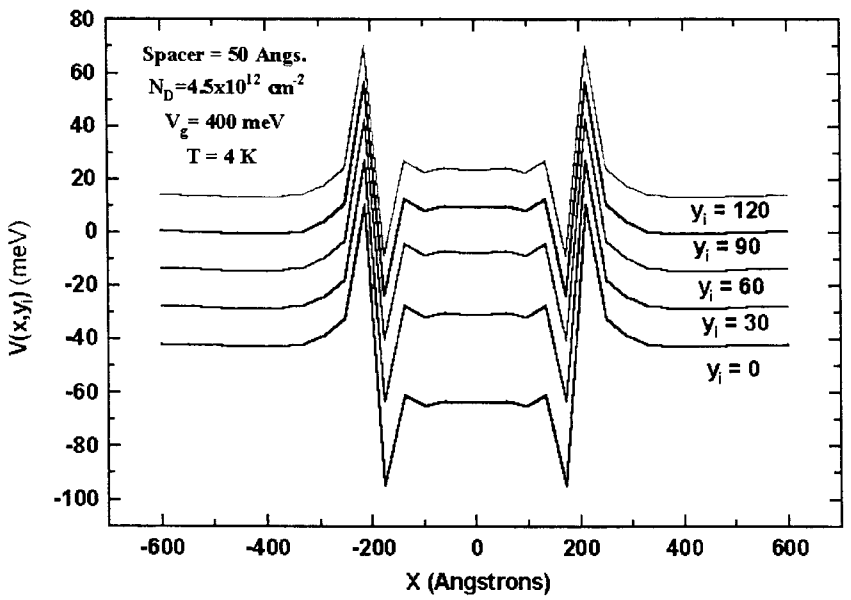


Figura 4.35: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 400$ mV.

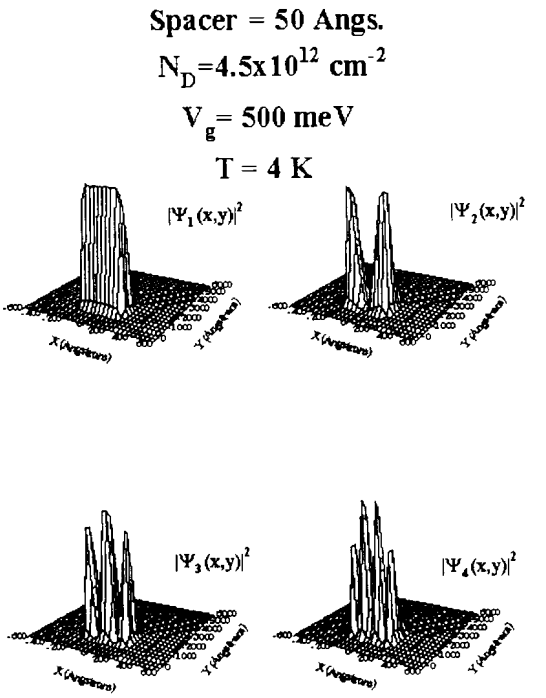


Figura 4.36: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 500$ mv.

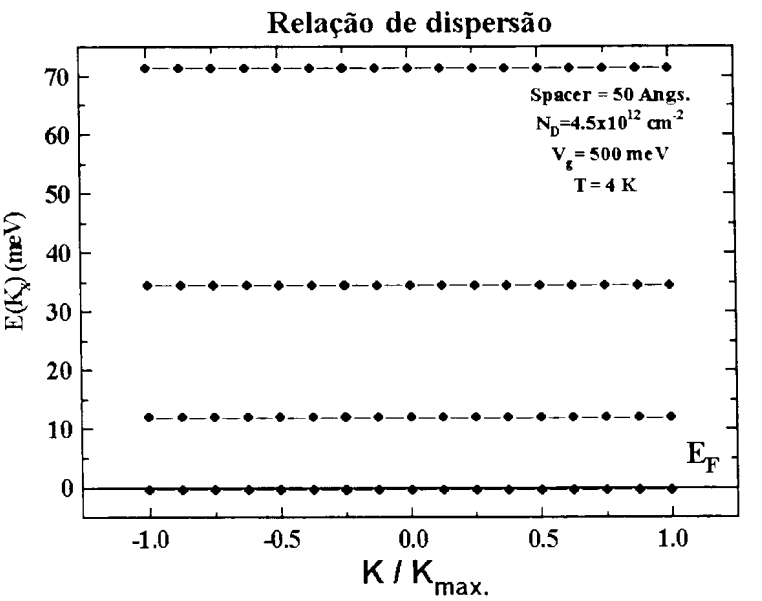


Figura 4.37: Relação de dispersão para $V_g = 500$ mv.

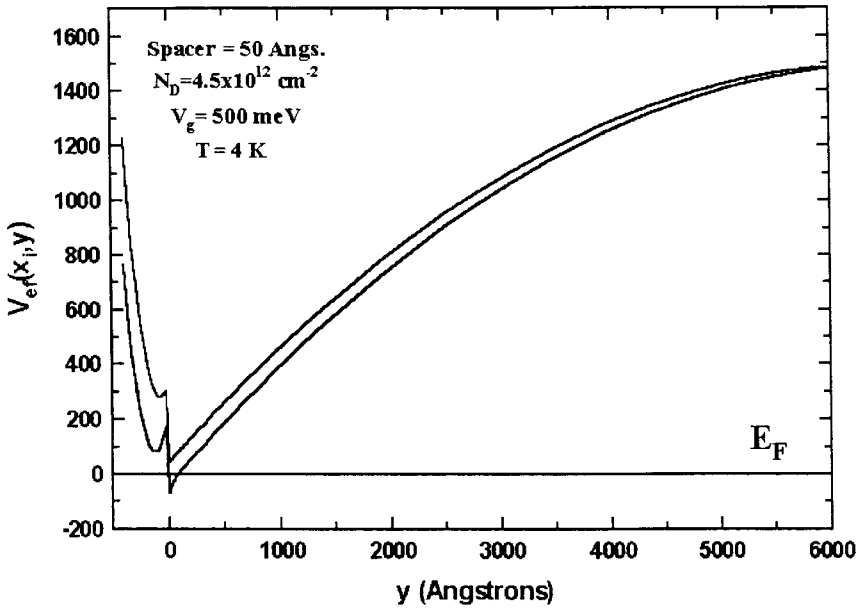


Figura 4.38: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 500$ mV.

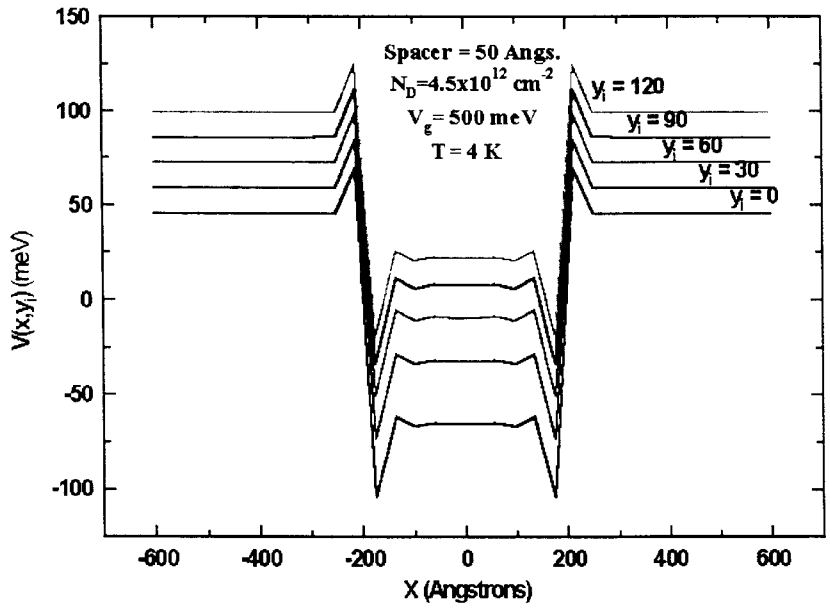


Figura 4.39: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 500$ mV.

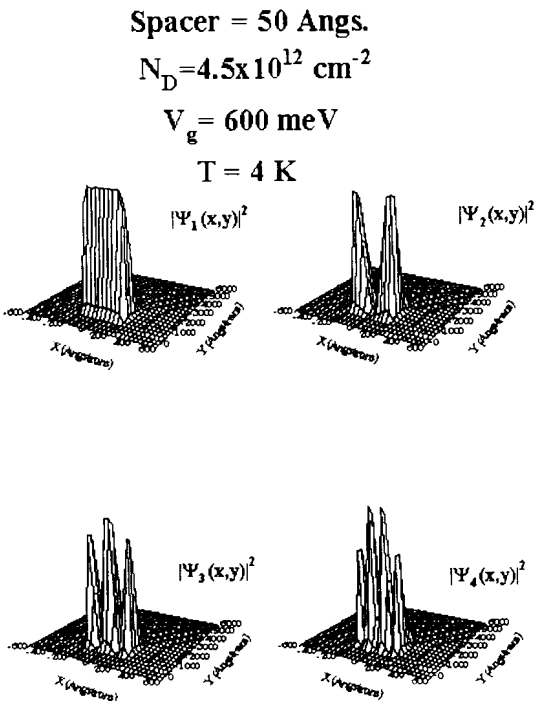


Figura 4.40: Densidade de probabilidade em $k_x = 0$, para $V_g = 600$ mv.

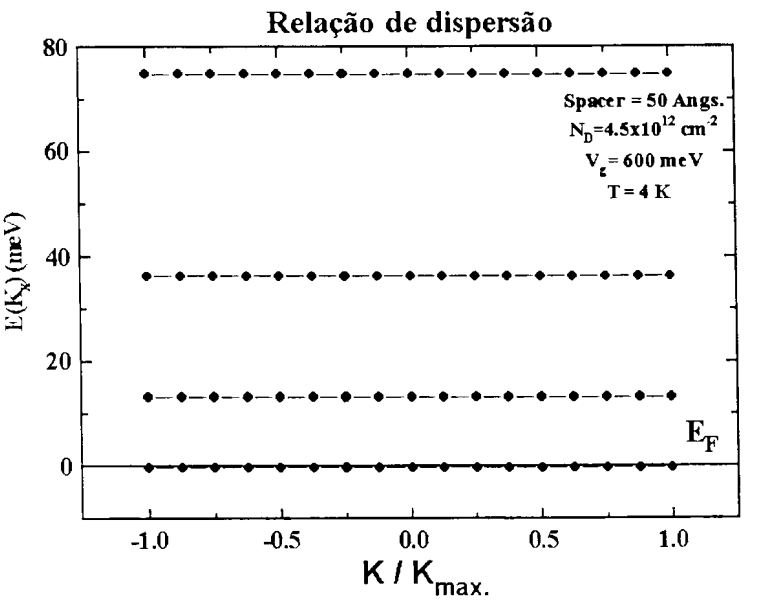


Figura 4.41: Relação de dispersão para $V_g = 600$ mv.

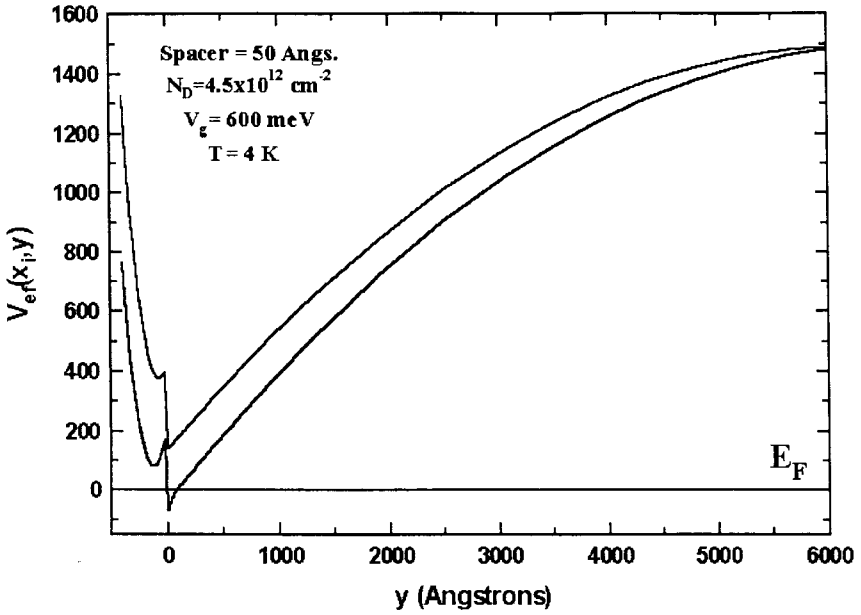


Figura 4.42: Perfil de potencial paralelo a direção y, em dois planos distintos, o primeiro passando pelo gate e segundo em na região entre os gates. $V_g = 600$ mV.

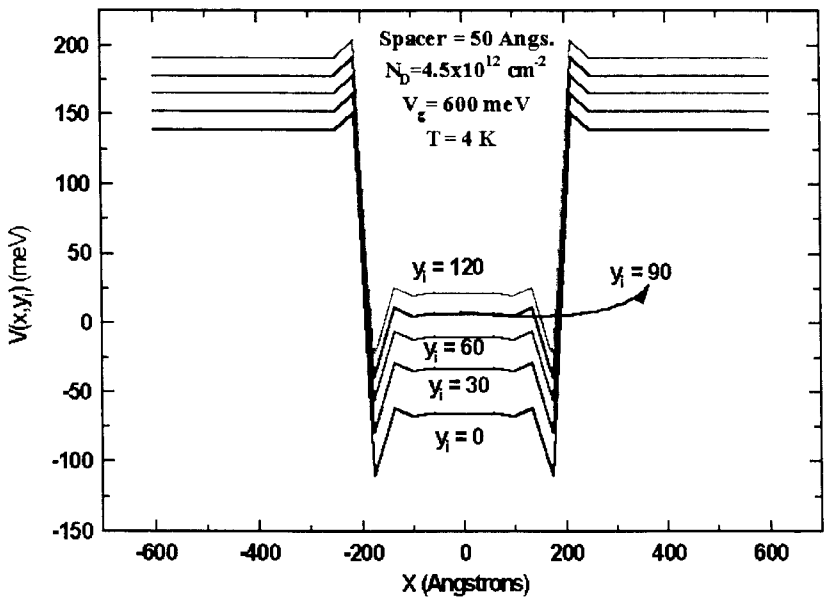


Figura 4.43: Perfil de potencial paralelo a direção x. $V_g = 600$ mV.

4.5 Cálculo da Condutância e da Capacitância

Nesta seção iremos investigar a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D, através da condutância do sistema na direção x e capacitância do sistema. Inicialmente iremos calcular a condutância deste sistema na direção x, e para isto usaremos a seguinte expressão obtida da teoria da resposta linear para a condutância (ver [73, 93–95]):

$$G_x = \frac{e^2 \tau L_y}{S_{xy} L_x \hbar^2} \sum_{k_x, n} \left(\frac{\partial \varepsilon_n (k_x)}{\partial k_x} \right)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_n} \right), \tag{4.1}$$

onde f é a função de Fermi-Dirac, L_x e L_y são respectivamente o comprimento do sistema nas direções x e y, e S_{xy} é a área do sistema no plano xy. Em unidades adimensionais podemos reescrever esta expressão como:

$$G_x = \frac{e^2 \tau}{\hbar^2} Ry \times \begin{cases} \sum\limits_{k_x, n} \left(\frac{\partial \varepsilon_n (k_x)}{\partial k_x} \right)^2 \cdot \beta \cdot f(\varepsilon_n) \cdot [1 - f(\varepsilon_n)] & \text{se } T \neq 0 \\ \sum\limits_{k_x, n} \left(\frac{\partial \varepsilon_n (k_x)}{\partial k_x} \right)^2 . \delta(\varepsilon - \varepsilon_f) & \text{se } T = 0 \end{cases} . \tag{4.2}$$

Da expressão acima vemos que a condutância depende diretamente da derivada segunda da relação de dispersão do sistema. Utilizando as dispersões mostradas anteriormente, nós calculamos a condutância do sistema e o resultado obtido é mostrado na figura 4.44. O resultado obtido mostra que a condutância decai muito rapidamente a medida em que aumentamos a voltagem aplicada aos *gates*. Ao compararmos os resultados que obtivemos (ver figura 4.44) para a condutância, com os resultados experimentais obtidos por Okada et al. [4] (figuras 4.8 e 4.9), vemos que o nosso resultado concorda qualitativamente muito bem com os resultados experimentais, apesar de serem sistemas um pouco diferentes.

Na figura 4.44 não temos condições de identificar a mudança do gás de elétrons de um regime quase-2D para um quase-1D, porque esta mudança de regime do gás de elétrons afeta muito a condutância, o que dificulta a localização da região onde a mesma ocorre. Para identificar tal mudança devemos olhar para o gráfico do logaritmo da condutância (figura 4.45) no qual vemos que ocorre uma mudança de comportamento para uma voltagem de 500 mV. Esta mudança de comportamento reflete a transição de um gás de elétrons, e a mesma coincide com o resultado obtido na análise qualitativa feita na seção anterior. Com a capacitância temos melhores condições de determinar esta região onde ocorre a mudança de regime.

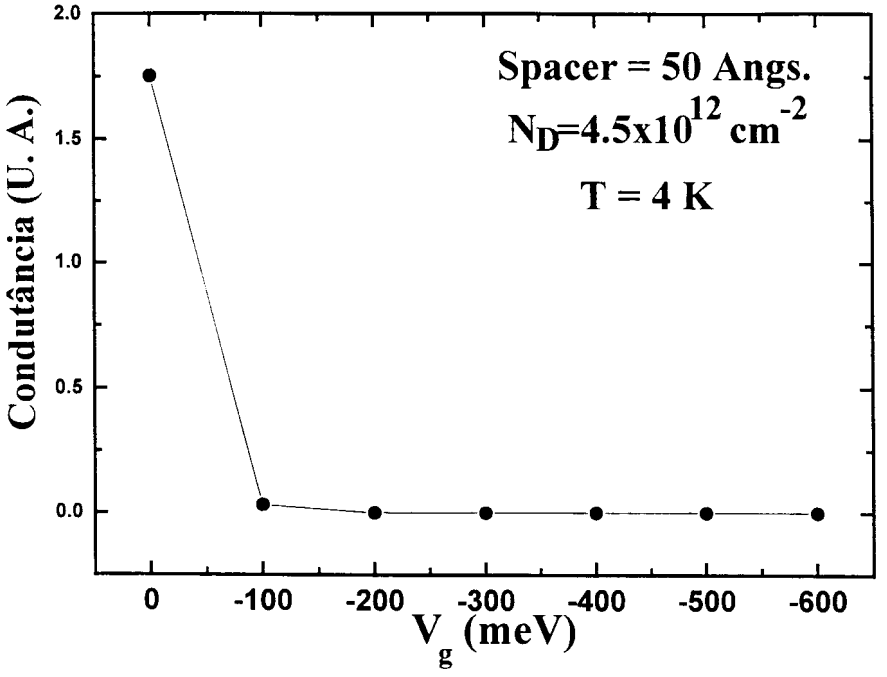


Figura 4.44: Condutância versus voltagem para uma temperatura de 4.0 K.

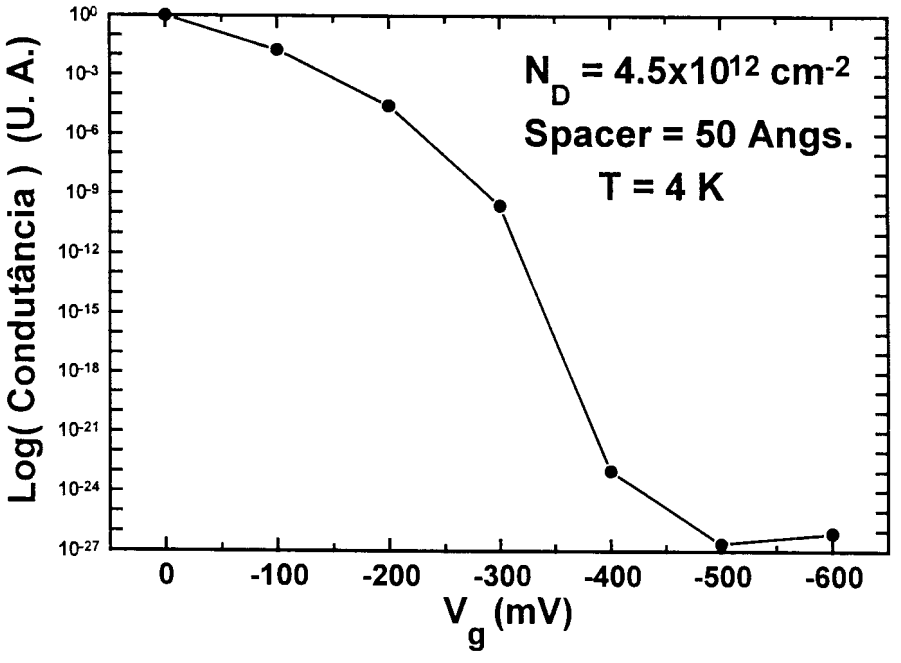


Figura 4.45: Logaritmo da condutância versus voltagem para uma temperatura de 4.0 K.

Agora iremos investigar a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D analisando o comportamento da capacitância do gás de elétrons em função da voltagem aplicada aos *gates*. A capacitância pode ser calculada usando a seguinte expressão:

$$C = \frac{dQ}{dV_g} = \frac{e\int_{\Delta V} n(x,y)\, dV}{\Delta V_g} = \frac{L_z\, e \sum_i \Delta N_i}{\Delta V_g} \tag{4.3}$$

Na figura 4.46 (a) mostramos a população total do sistema em função da voltagem aplicada, e na figura 4.46 (b) mostramos a capacitância obtida em nossos cálculos. Novamente nossos resultados para a capacitância concordam qualitativamente com os resultados experimentais de Okada et al. [4] (figura 4.10). Como a capacitância está relacionada com a geometria do gás de elétrons, então as características geométricas do gás de elétrons serão refletidas na capacitância.

Para $0 > V_g > -300$ mV o gás de elétrons está estendido sobre todo o sistema, como mostra as figuras 4.18, 4.20, 4.24 e 4.28 das densidades de probabilidades, e a capacitância é praticamente a mesma. Em $V_g = -300$ mV a capacitância decai abruptamente, refletindo a redução da área efetiva quando o sistema eletrônico é contraído em canais isolados entre as regiões dos *gates*, como podemos ver das figuras 4.32, 4.36 e 4.40 das densidades de probabilidades, principalmente a do estado fundamental. já a segunda mudança de comportamento da capacitância ocorre em $V_g = -500$ mV, reflete o confinamento de todas as sub-bandas, como podemos ver nas figuras 4.32 e 4.36 das densidades de probabilidades.

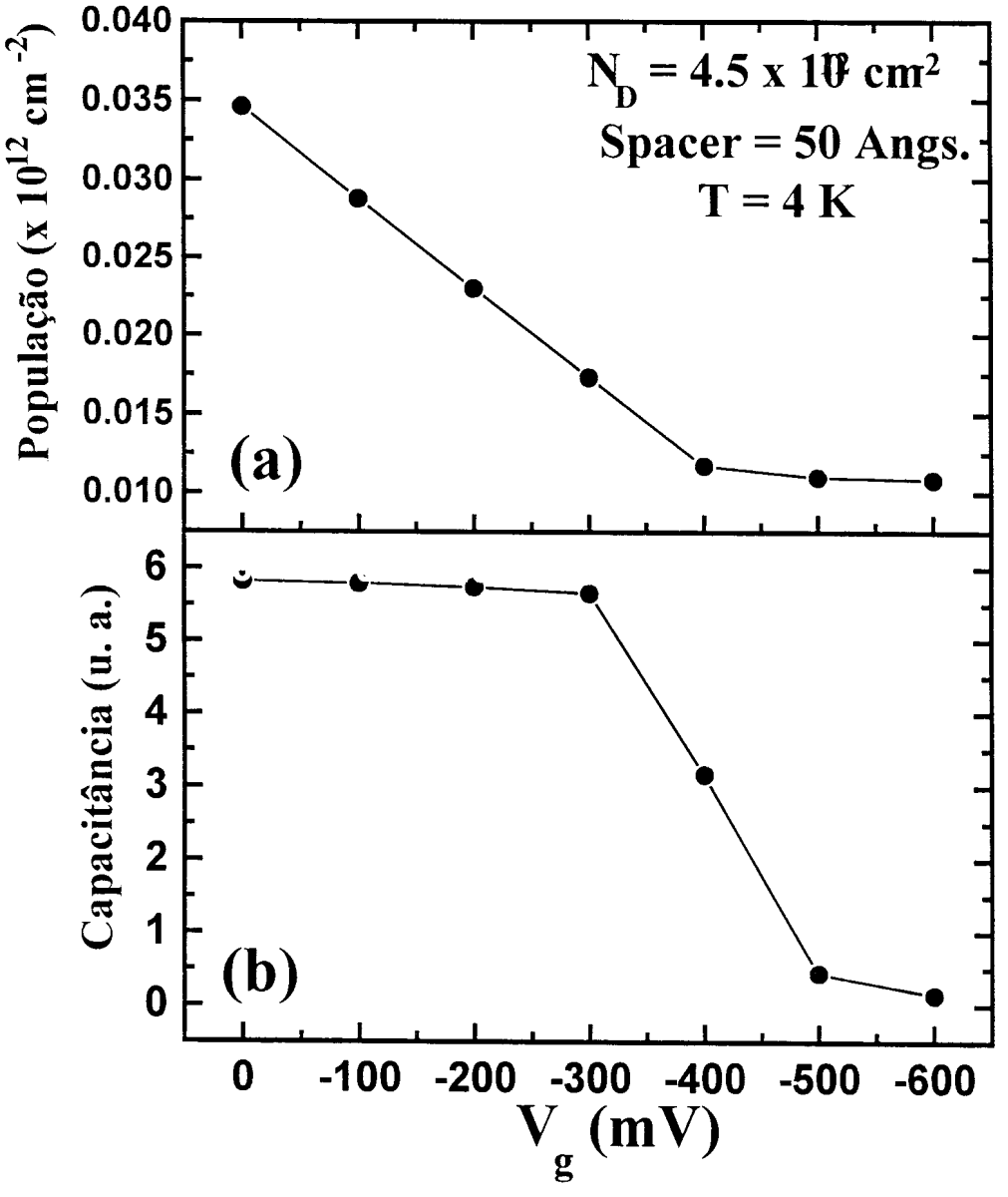


Figura 4.46: (a) Aqui temos a população total do sistema em função da voltagem aplicada aos *gates*. (b) Temos a capacitância versus voltagem aplicada aos *gates*.

4.6 Conclusões

Neste capítulo investigamos as propriedades eletrônicas e de transporte de uma super-rede de fios quânticos (figura 4.3), em função da voltagem, da densidade de impurezas doadoras e da temperatura. Nesta heteroestrutura investigamos a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D, através das densidades de probabilidades, das relações de dispersão, da condutância e da capacitância. Verificamos também, que os nossos resultados concordam qualitativamente com os resultados experimentais para a condutância e capacitância, obtidos por Okada et al. [4].

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho estudamos dois sistemas quase-unidimensionais com potenciais de confinamento com origens diferentes. No capítulo 3 estudamos a formação de um gás de elétrons quase-1D, em fios quânticos do tipo *V-groove*, os quais possuem um potencial de confinamento do tipo dentes de serra. Neste sistema nossos resultados mostram que há formação de um gás de elétrons quase-unidimensional, tanto na região côncava quanto convexa do $GaAs$ e que ela só depende da densidade de impurezas doadoras (a posição do confinamento). A região onde é realizado o confinamento não é sensível a voltagem aplicada ao gate, ela não muda com a voltagem, o que muda com a voltagem é a ocupação de cada nível e portanto o quão confinado pode estar o sistema. Utilizamos a voltagem aplicada ao *gate* para controlarmos a população das sub-bandas do sistema, tentando sempre que possível manter somente o primeiro estado populado. Variando a voltagem e a densidade de impurezas doadoras, encontramos estados estendidos sobre todo o sistema, os quais apresentam características dos sistemas quase-2D. A primeira característica está no fato da densidade de probabilidade estar estendida sobre todo o sistema e a segunda está na diminuição dos espaçamentos em energia entre as sub-bandas. Investigamos os efeitos da voltagem aplicada aos gates, da densidade de impurezas doadoras ionizadas e da largura do *spacer*.

No capítulo 4, o sistema estudado possui um potencial de confinamento de origem

eletrostática, permitindo desta forma controlá-lo através da voltagem aplicada aos gates. Neste sistema investigamos as propriedades eletrônicas e de transporte da heteroestrutura apresentada na figura 4.3, em função da voltagem, da densidade de impurezas doadoras e da temperatura. Nesta heteroestrutura investigamos a transição de um gás de elétrons quase-2D para um quase-1D, através das densidades de probabilidades, das relações de dispersão, da condutância e da capacitância. Verificamos também, que os nossos resultados concordam qualitativamente bem com os resultados experimentais para a condutância e capacitância, obtidos por Okada et al. [4].

O cálculo autoconsistente dos estados eletrônicos destes sistemas quase-unidimensionais foi feito utilizando a técnica do *Split-Operator* cuja a característica mais importante desta técnica é a possibilidade de estudarmos a evolução temporal dos sistema em tempo real, ainda não foi estudada mas será o próximo passo.

Para continuidade a este trabalho pretendemos introduzir um campo magnético paralelo aos *gates* com um gauge adequado, para verificarmos quais são os seus efeitos no confinamento, principalmente em regiões de campo magnético onde não se pode usar teoria de perturbação para realizar uma investigação mais precisa. Ao variarmos o campo magnético aplicado ao sistema teremos uma competição entre o potencial de confinamento lateral devido aos *gates* e o do campo magnético. Pretendemos também calcular a magneto-capacitância e a magneto-condutância para diversos valores de campo magnético e comparar com os resultados experimentais de Drexler et al. [15].

Apêndice A

Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário

Para verificar que a função de onda evolui para o estado fundamental quando a propagação é feita no domínio de tempos imaginários, considere um sistema com um Hamiltoniano independente do tempo, cujos os auto-estados são $|\phi_n\rangle$ com autovalores ε_n, tal que, $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \cdots < \varepsilon_n$. Assim, uma função de onda $|\Psi(t)\rangle$ qualquer pode ser expandida na base desse Hamiltoniano, sendo dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n \exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right)|\phi_n\rangle\,. \tag{A.1}$$

Fazendo $t = -i\tau$ tem-se:

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)|\phi_n\rangle\,. \tag{A.2}$$

Calculando a norma da equação (A.1):

$$\langle\Psi(t)\,|\Psi(t)\rangle = \int |\Psi(\vec{r},\tau)|^2 d^3r = \sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) = \frac{1}{N^2}, \tag{A.3}$$

logo,

$$|\Psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{\sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)|\phi_n\rangle}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}}, \tag{A.4}$$

de onde verifica-se que a norma depende de τ.

Da equação (A.3):

$$|\Psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{a_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0 \tau}{\hbar}\right)|\phi_0\rangle + a_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1 \tau}{\hbar}\right)|\phi_1\rangle + \cdots}{a_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0 \tau}{\hbar}\right)\sqrt{1 + |\frac{a_1}{a_0}|^2 \exp\left(2\frac{(\varepsilon_0-\varepsilon_1)\tau}{\hbar}\right) + \cdots}},$$

$$|\Psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{|\phi_0\rangle + \sum_{i>0} \frac{a_i}{a_0} \exp\left(\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)|\phi_i\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{i>0} |\frac{a_i}{a_0}|^2 \exp\left(\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)}}. \tag{A.5}$$

Portanto, ve-se que

$$\lim_{\tau\to\infty} |\Psi(\tau)\rangle^{norm} = |\phi_0\rangle\,. \tag{A.6}$$

Agora iremos mostrar que uma vez encontrado o estado fundamental do sistema,

$$|\Psi_0\rangle = \sum_n a_n\, e^{-\varepsilon_n \tau/\hbar}\,|\phi_n\rangle \qquad \lim_{t\to\infty} |\Psi_0\rangle = |\phi_0\rangle \tag{A.7}$$

podemos encontrar os outros autoestados utilizando a ortonormalização de Gram-Schmidt na eq. (2.21), escrevendo o primeiro estado excitado como

$$|\varphi_1\rangle = \sum_n b_n\, e^{-\varepsilon_n \tau/\hbar}\,|\phi_n\rangle \tag{A.8}$$

como, $|\Psi_0\rangle = |\phi_0\rangle$, pois o sistema já convergiu, então

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = \sum_n |b_n|^2\, e^{-2\varepsilon_n\tau/\hbar} \tag{A.9}$$

$$|\Psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\varphi_1(\tau)\rangle - \langle\Psi_0(\tau)|\varphi_1(\tau)\rangle|\Psi_0(\tau)\rangle}{\sqrt{\langle\varphi_1(\tau)|\varphi_1(\tau)\rangle - |\langle\Psi_0(\tau)|\varphi_1(\tau)\rangle|^2}}. \tag{A.10}$$

$$\langle\Psi_0|\varphi_1\rangle = \langle\phi_0|\varphi_1\rangle = b_0\, e^{-\varepsilon_0\tau/\hbar} \tag{A.11}$$

$$|\Psi_1(\tau)\rangle = \frac{\sum_n b_n\, e^{-\varepsilon_n\tau/\hbar}\,|\phi_n\rangle - b_0\, e^{-\varepsilon_0\tau/\hbar}|\phi_0\rangle}{\sqrt{\sum_n |b_n|^2\, e^{-2\varepsilon_n\tau/\hbar} - |b_0|^2\, e^{-2\varepsilon_0\tau/\hbar}}}. \tag{A.12}$$

$$|\Psi_1(\tau)\rangle = \frac{\sum_{n>0} b_n\, e^{-\varepsilon_n\tau/\hbar}\,|\phi_n\rangle}{\sqrt{\sum_{n>0} |b_n|^2\, e^{-2\varepsilon_n\tau/\hbar}}}. \tag{A.13}$$

$$|\Psi_1(\tau)\rangle = \frac{b_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1\tau}{\hbar}\right)|\phi_1\rangle + b_2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_2\tau}{\hbar}\right)|\phi_2\rangle + \cdots}{b_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1\tau}{\hbar}\right)\sqrt{1 + |\frac{b_2}{b_1}|^2 \exp\left(2\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\tau}{\hbar}\right) + \cdots}}, \tag{A.14}$$

$$|\Psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\phi_1\rangle + \sum_{i>1} \frac{b_i}{b_1} \exp\left(\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)|\phi_i\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{i>1} |\frac{b_i}{b_1}|^2 \exp\left(2\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)}}, \tag{A.15}$$

Como $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \cdots \varepsilon_n$, então $(\varepsilon_1 - \varepsilon_i) < 0$ para $i > 1$, então

$$\lim_{\tau \to \infty} |\Psi_1(\tau)\rangle = |\phi_1\rangle. \tag{A.16}$$

Para obtermos os outros autoestados, repetimos este processo em ordem crescente de energia.

Apêndice B

Simulação Semi-Clássica de Difusão e Deriva

Na aproximação semi-clássica da difusão e deriva, as variáveis dependentes são a densidade eletrônica n, a densidade de buracos p, e o potencial eletrostático φ. As equações básicas são descritas como segue:

B.1 Equação de Poisson

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\epsilon \vec{\nabla} \varphi\right) = -q \left(N_D^+ - N_A^- + p - n\right) \tag{B.1}$$

onde q é a magnitude da carga de um elétron, ϵ é a constante dielétrica, e N_D^+ e N_A^- são as concentrações de doadores e aceitadores ionizados. Cosideraremos que ambos os doadores e os aceitadores estão ionizados.

B.2 Equações de Continuidade das Correntes

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J_n} = q \cdot R \tag{B.2}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J_p} = -q \cdot R \tag{B.3}$$

onde $\vec{J}_n$ e $\vec{J}_p$ são respectivamente os vetores densidade de corrente eletrônica e de buraco, e R é a taxa de recombinação Shockley-Read-Hall, com a suposição de que o tempo de vida média dos portadores é de 1.0 ns.

B.3 Equações das Densidades de Correntes

$$\vec{J}_n = -q\mu_n n \vec{\nabla}\phi_n \tag{B.4}$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p p \vec{\nabla}\phi_p \tag{B.5}$$

onde μ_n e μ_p são as mobilidades dos elétrons e dos buracos, e ϕ_n e ϕ_p são os quase níveis de Fermi dos elétrons e dos buracos. Muitas simulações usam um algoritmo o qual é baseado no quase nível de Fermi dos elétrons e dos buracos em vez de calculá-los diretamente através das concentrações dos elétrons e dos buracos,

$$\phi_n = \varphi - \ln(n) \tag{B.6}$$

$$\phi_p = \varphi + \ln(p)\,. \tag{B.7}$$

As equações (B.1), (B.2), (B.3), (B.4) e (B.5) são discretizadas pelo método das diferenças finitas e resolvidas autoconsistentementes, usando o esquema de Gummel [96]. As densidades dos elétrons e dos buracos são dadas pelas seguintes expressões:

$$n = n_i\, e^{[(\varphi+\theta-\gamma_n)-\phi_n]/V_T} \tag{B.8}$$

$$p = n_i\, e^{\left[\phi_p-\left(\varphi+\theta-\gamma_p\right)\right]/V_T} \tag{B.9}$$

onde n_i é a densidade de portadores intrínsecos, V_T é a voltagem térmica ($V_T = K_B T/q$), e γ_n e γ_p são parâmetros de degenerescência para levar em conta a estatística de Fermi-Dirac. O parâmetro da banda θ é definido como a diferença de energia entre o nível do vácuo e o nível de Fermi intrínseco,

$$\theta = -\varphi_0 + \chi + \frac{1}{2}E_g - \frac{1}{2}V_T \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right), \tag{B.10}$$

onde φ_0 é o potencial de referência, χ é a afinidade eletrônica que é definido como a distância em energia entre o fundo da banda de condução e o nível do vácuo, E_g é o *gap* de energia, N_c e N_v são as densidades de estados efetivas na banda de condução e de valência respectivamente.

Bibliografia

[1] A. Sawada, T. Usagawa, S. Ho, and K. Yamaguchi. Possible new structure for one-dimensional electron-gas systems by interface bending of n-AlGaAs/u-GaAs heterojunctions. Appl. Phys. Lett., **60**(12), 1492, 1992.

[2] K. Vacek, A. Sawada, and T. Usagawa. One-dimensional quantum electron states in n-AlGaAs/u-GaAs modulation-doped corrugated heterojunctions. Appl. Phys. Lett., **65**(24), 3096, 1994.

[3] J. H. Davies and A. R. Long. Physics of Nanostructures. A NATO Advanced Study Institute., 1991. Proceedings of the Thirty-Eight Scottish Summer School in Physics, St. Andrews.

[4] M. Okada, T. Ohshima, M. Matsuda, N. Yokoyama, and A. Shibatomi. Quasi-one-dimensional channel $GaAs/AlGaAs$ modulation doped FET using a corrugated gate structure. Jap. J. Appl. Phys., **27**(12), L2424, 1988.

[5] A. C. Gossard. Growth of microstructures by molecular beam epitaxy. IEEE Journal of Quantum Electronics, **QE-22**(9), 1649, 1986.

[6] K. Kash. Optical properties of III-V semiconductor quantum wire and dots. J. Luminescence, **46**, 69, 1990.

[7] K. Kojima, K. Mitsunaga, and K. Kyuma. Fabrication and characterization of quantum well wires grown on corrugated $GaAs$ substrates by molecular beam epitaxy. Appl. Phys. Lett., **56**(2), 154, 1990.

[8] C. Weisbuch and B. Vinter. Quantum semiconductor structures. Academic Press, San Diego, 1991.

[9] R. Cingolani and R. Rinaldi. Electronic states and optical transitions in low-dimensional semiconductors. Rivista del Nuovo Cimento, **16**(9), 1, Cingolani93.

[10] S. Koshiba, H. Noge, H. Ichinose, H. Akiyama, Y. Nkamura, T. Inoshita, T. Someya, K. Wada, A. Shimizu, and H. Sakaki. MBE growth of $GaAs$ nanometer-scale

ridge quantum wires structures and their structural and optical characterizations. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 729, 1994.

[11] Y. Arakawa. Fabrication of quantum wires and dots by MOCVD selective growth. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 523, 1994.

[12] D. Bertram, B. Spill, W. Stolz, and E. O. Göbel. Direct epitaxial growth of $(AlGa)As/GaAs$ quantum wires by orientation-dependent metalorganic vapour phase epitaxy. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 591, 1994.

[13] T. P. Smith III, H. Arnot, J. M. Hong, C. M. Knoedler, S. E. Laux, and H. Schmid. Capacitance oscillations in one-dimensional electron systems. Phys. Rev. Lettt., **59**(24), 2802, 1987.

[14] K. Y. Lee, T. P. Smith III, H. Arnot, C. M. Knoedler, J. M. Hong, D. P. Kern, and S. E. Laux. Fabrication and characterization of one- and zero-dimensional electron systems. J. Vac. Sci. Technol. B, **6**(6), 1856, 1988.

[15] H. Drexler, W. Hansen, S. Manus, J. P. Kotthaus, M. Holland, and S. P. Beaumont. One-dimensional electron channels in the quantum limit. Phys. Rev. B, **49**(19), 14074, 1994.

[16] J. N. Randall, M. A. Reed, R. J. Matyi T. M. Moore, and J. W. Lee. Microstructure fabrication and transport through quantum dot. J. Vac. Sci. Technol. B, **6**(1), 302, 1988.

[17] J. N. Randall, M. A. Reed, R. J. Matyi, and T. M. Moore. Nanostructure fabrication of zero-dimensional quantum dot diodes. J. Vac. Sci. Technol. B, **6**(6), 1861, 1988.

[18] K. Ismail, D. A. Antoniadis, and H. I. Smith. One-dimensional subbands and mobility modulation in $GaAs/AlGaAs$ quantum wires. Appl. Phys. Lett., **54**(12), 1130, 1989.

[19] H. van Houten, B. J. van Wess, M. G. J. Heijman, and J. P. André. Submicron conducting channels defined by shallow mesa etch in $GaAs$-$AlGaAs$ heterojunctions. Appl. Phys. Lett., **49**(26), 1781, 1986.

[20] T. Hiramoto, K. Hirakawa, Y. Iye, and T. Ikoma. One-dimensional $GaAS$ wires fabricated by focused ion beam implantation. Appl. Phys. Lett., **51**(20), 1620, 1987.

[21] T. Hiramoto, K. Hirakawa, Y. Iye, and T. Ikoma. Fabrication of one-dimensional $GaAS$ wires by focused ion beam implantation. J. Vac. Sci. Technol. B, **6**(3), 1014, 1988.

[22] F. Brinkop, W. Hansen, J. P. Kotthaus, and K. Ploog. One-dimensional Subbands of narrow electron channels in gated $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heterojunctions. Phys. Rev. B, **37**(11), 6547, 1988.

[23] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossard, and J. H. English. Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in $GaAs$ quantum well wires and boxes. Appl. Phys. Lett., **49**(19), 1275, 1986.

[24] W. Hansen, M. Horst, J. P. Kotthaus, U. Merkt, C. H. Sikorski, and K. Ploog. Intersubbabd resonance in quasi one-dimensional inversion channels. Phys. Rev. Lett., **58**(24), 2586, 1987.

[25] H. Temkin, G. J. Dolan, M. B. Panish, and S. N. G. Chu. Low-temperature photoluminescence from $InGaAs/InP$ quantum wires and boxes. Appl. Phys. Lett., **50**(7), 413, 1987.

[26] S. M. Wang, G. Treideris, W. Q. Chen, and T. G. Anderson. Spectroscopy of electronic states in $InSb$ quantum dots. Phys. Rev. Lett., **62**(18), 2164, 1989.

[27] S. R. Andrews and H. E. G. Arnot. Fabrication and optical properties of quantum dots and wires. Superlatt. and Microstruc., **9**(4), 433, 1991.

[28] E. Kapon, M. Walther, J. Christen, M. Grundmann, D. M. Hwang C. Caneau, E. Colas, R. Bhat, G. H. Song, and D. Bimberg. Quantum wire heterostructures for optoelectronic applications. Superlatt. Microstruct., **12**(4), 491, 1992.

[29] C. Vieu, M. Schneider, G. Benassayag, R. Pianel, L. Birotheau, J. Y. Marzin, and B. Descouts. Optimized selective mixing of a $GaAs/GaAlAs$ quantum well for fabrication of quantum wires. J. Appl. Phys., **71**(10), 5012, 1992.

[30] C. Weisbuch. Recent progress in III-V quantum optoelectronic devices. J. Crys. Grow., **138**, 776, 1994.

[31] Y. Arakawa and A. Yariv. Quantum well lasers - gain, spectra, dynamics. IEEE Journal of Quantum Electronics, **QE-22**(9), 1887, 1986.

[32] A. Scherer and B. P. Van der Gaag. Characterization of nanostructures by reflection electron microscopy. Appl. Phys. Lett., **56**(25), 2566, 1990.

[33] B. Jogai and D.C. Reynolds. Optical properties of quantum wire superlattices. Superlatt. Microstruct., **11**(4), 457, 1992.

[34] F. Rossi and E. Molinari. Linear and nolinear optical properties of realistic quantum-wire structures: The dominant role of Coulomb correlation. Phys. Rev. B, **53**(24), 16462, 1996.

[35] D. Jovanovic, J. P. Leburton, K. Ismail, J. M. Bigelow, and M. H. Degani. Intersubband optic phonon resonances in electrostatically confined quantum wires. Appl. Phys. Lett., **62**(22), 2824, 1993.

[36] A. Ya. Shik. Calculation relating to a semiconductor structure with a quasione-dimensional electron gas. Sov. Phys. Semicond., **19**(8), 915, 1985.

[37] S. E. Laux, D. J. Frank, and F. Stern. Quasi-one-dimensional electron states in a split-gate $GaAs/AlGaAs$ heterostructure. Surface Science, **196**, 101, 1988.

[38] J. H. Davies. Electronic states in narrow semiconducting wires near threshold. Semicond. Sci. Technol., **3**, 995, 1988.

[39] V. B. Shikin and I. Nachev. Edge electrons states in charged two-dimensional systems. Surface Science, **196**, 494, 1988.

[40] V. B. Shikin, T. Demel', and D. Heitman. Quasi-one-dimensional electron systems in semiconductors. Sov. Phys. JETP, **69**(4), 797, 1989.

[41] M. E. Sherwin and T. J. Drummond. A parametric investigation of AlGaAs/GaAs modulation-doped quantum wires. J. Appl. Phys., **66**(11), 5444, 1989.

[42] M. B. Patil and Morkoç. Self-consistent calculation of electron density in a two-channel modulation-doped structure. Solid-State Electronics, **34**(1), 99, 1990.

[43] Hong Yu and J. C. Hermanson. Electronic structure of a quasi-one-dimensional electron gas at finite temperature. J. Vac. Sci. Technol. B, **8**(4), 817, 1990.

[44] P. E. Schmidt, M. Okada, K. Kosemura, and N. Yokoyama. Additivity of the quantized conductance of multiple parallel quantum point contacts. Jap. J. Appl. Phys., **30**(11B), L1921, 1991.

[45] A. Nakamura and A. Okiji. Hartree-Fock treatment for the electron states in the quantum wire. J. Phys. Soc. Jap., **60**(06), 1873, 1991.

[46] Craig Pryor. Electronic structure and optical properties of serpentine superlattice quantum-wire array. Phys. Rev. B, **44**(23), 12912, 1991.

[47] T. Kerkhoven, M. W. Raschke, and U. Ravaioli. Self-consistent simulation of corrugated layered structures. Superlatt. Microstruct., **12**(4), 505, 1992.

[48] T. Kerkhoven, M. W. Raschke, and U. Ravaioli. Self-consistent simulation of quantum wires in periodic heterojunction structures. J. Appl. Phys., **74**(2), 1199, 1993.

[49] J. H. Luscombe, A. M. Bouchard, and M. Luban. Self-consistent screening potentials in quantum nanostructures role of confined states. Superlatt. Microstruct., **11**(3), 357, 1992.

[50] J. H. Luscombe, A. M. Bouchard, and M. Luban. Electron confinement in quantum nanostructures: Self-consistent Poisson-Schödinger theory. Phys. Rev. B., **46**(16), 10262, 1992.

[51] J. H. Luscombe. Current issues in nanoelectronic modelling. Nanotechnology, **4**, 1, 1993.

[52] M. Macucci, U. Ravaioli, and T. Kerkhoven. Analysis of electron transfer between parallel quantum wires. Superlatt. Microstruct., **12**(4), 509, 1992.

[53] Y. Takagaki and D. K. Ferry. Electronic conductance of a two-dimensional electron gas in the presence of periodic potentials. Phys. Rev. B, **45**(15), 8506, 1992.

[54] Henry K. Harbury, Wolfgang Porod, and Craig S. Lent. Field effects in self-consistent transport calculations for narrow split-gate structures. Superlattices and Microstructures, **11**(2), 189, 1992.

[55] U. Ravaioli, T. Kerkhoven, M. W. Raschke, and A. T. Galick. Numerical simulation of electron confinement in contiguous quantum wires. Superlatt. Microstruct., **11**(3), 343, 1992.

[56] F. A. Reboredo and C. R. Proetto. Modulation-doped quantum-well wires: Ground-state properties. Phys. Rev. B, **48**(20), 15158, 1993.

[57] Y. Sun and G. Kirczenow. Density-functional theory of the electronic structure of Coulomb-confined quantum wires. Phys. Rev. B, **47**(8), 4413, 1993.

[58] Z. Wu and P. P. Ruden. Self-consistent calculation of the electronic structure of semiconductor quantum wires: Semiclassical and quantum mechanical approaches. J. Appl. Phys., **74**(10), 6234, 1993.

[59] Y. Takagaki, K. J. Friedland, and K. Ploog. Electron distribution in a periodically line-doped GaAs. Appl. Phys. Lett., **64**(24), 3258, 1994.

[60] C. Y. Fong, H. Zhong, and B. M. Klein. Donor states in coupled quantum dots. Phys. Rev. B, **49**(11), 7466, 1994.

[61] D. Jovanovic and J. P. Leburton. Self-consistent analysis of single-electron charging effects in quantum-dot nanostructures. Phys. Rev. B, **49**(11), 7474, 1994.

[62] J. M. Bigelow and J. P. Leburton. Self-consistent simulation of quantum transport in dual-gate field-effect transistors. J. Appl. Phys., **76**(5), 2887, 1994.

[63] D. Jovanovic, J. P. Leburton, H. Chang, R. Grudbacher, and I. Adesida. Disorder-induced resonant tunneling in planar quantum-dot nanostructures. Phys. Rev. B, **50**(08), 5412, 1994.

[64] A. J. Peck and S. J. Bending. A new approach to the modelling of GaAs/AlGaAs nanostructures. Semicond. Sci. Technol., **9**, 188, 1994.

[65] S. A. Leão and M. H. Degani. Self-consistent calculation of the electronic properties of quantum well wires. Braz. J. Phys., **26**(01), 337, 1996.

[66] D. Kosloff and R. Kosloff. A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation as a tool in molecular dynamics. J. Phys. Chem., **52**, 35, 1983.

[67] M. D. Feit and J. A. Fleck Jr. Solution of Schrödinger equation by a spectral method II: vibrational energy levels of triatomic molecules. J. Phys. Chem., **78**(8), 301, 1983.

[68] M. D. Feit and J. A. Fleck Jr. Wave packet dynamics and chaos in the Hénon-Heiles system. J. Phys. Chem., **80**(6), 2578, 1984.

[69] R. Kosloff. Time-dependent quantum-mechanical methods for molecular dynamics. J. Phys. Chem., **92**(8), 2087, 1989.

[70] M. H. Degani. Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices. Appl. Phys. Lett., **59**(1), 57, 1991.

[71] M. H. Degani. Electronic properties of multiple Si δ-doping in GaAs. J. Appl. Phys., **70**(8), 4362, 1991.

[72] M. H. Degani. Electron energy levels in a δ-doped layers in GaAs. Phys. Rev. B, **44**(11), 5580, 1991.

[73] M. H. Degani and J. P. Leburton. Single-electron states and conductance in lateral-surface superlattices. Phys. Rev. B, **44**(19), 10901, 1991.

[74] F. W. Dorr. The direct solution of the discrete Poisson equation on a rectangle. SIAM Review, **12**(02), 248, 1970.

[75] J. W. Eastwood and D. R. K. Brownrigg. Remarks on the solution of Poisson's equation for isolated systems. J. Comput. Phys., **32**, 24, 1979.

[76] A. F. Franz, G. A. Franz, S. Selberherr, C. Ringhofer, and P. Markowich. Finite boxes – A generalization of the finite-difference method suitable for semiconductor device simulation. IEEE Transactions On Electron Devices, **30**(9), 1070, 1983.

[77] W. H. Press, S. A. Tevkolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flamery. Numerical recipes in FORTRAN: The art of scientific computing. Cambridge University Press, 2nd. ed. edition, 1992.

[78] P. K. MacKeown and D. J. Newman. Computational Techniques in Physics. Adam Hilger, 1987.

[79] J. P. Colinge, X. Baie, V. Bayot, and E. Grivei. A silicon-on-insulator quantum wire. Solid-State Electronics, **39**(1), 49, 1996.

[80] C. Kiener, L. Rota, J. M. Freyland, K. Turner, A. C. Maciel, J. F. Ryan, U. Marti, D. Martin, F. Morier-Gemoud, and F. K. Reinhart. Electronic states in $GaAs$ v-groove quantum wire structures with superlattices barriers. Appl. Phys. Lett., **67**(19), 2851, 1995.

[81] W. Wegscheider, W. kang, L. N. Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer, and K. W. Baldwin. High-mobility transport along single quasi-1D quantum wires formed by cleaved edge overgrowth. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 547, 1994.

[82] N. Usami, T. Mine, S. Fukatsu, and Y. Shiraki. Fabrication of $SiGe/Si$ quantum wires structures on a v-groove patterned Si substrate by $GaAs$-source Si molecular beam epitaxy. Solid-State Electronics, **37**(4-6), 539, 1994.

[83] K. Kojima, K. Mitsunaga, and K. Kyuma. Calculation of two-dimensional quantum-confined structures using the finite element method. Appl. Phys. Lett., **55**(9), 882, 1989.

[84] Y. Arakawa, T. Yamauchi, and J. N. Schulman. Tight-binding analysis of energy-band structures in quantum wires. Phys. Rev. B, **43**(6), 4732, 1991.

[85] C. J. Anthony and M. J. Kelly. The effect of cross section on the electron states in quantum wire lasers. Semicond. Sci. Technol., **9**, 35, 1994.

[86] R. Rinaldi, P. V. Giugno, R. Cingolani, F. Rossi, E. Molinari, U. Marti, and F. K. Reinhart. Thermal ionization of excitons in V-shaped quantum wires. Phys. Rev. B, **53**(20), 13710, 1996.

[87] Temperton Clive. Self-sorting mixed-radix fast Fourier transform. J. Comput. Phys., **52**, 1, 1983.

[88] W. L. C. Lima. Estrutura eletrônica em sistemas com dopagem tipo delta. Dissertação de Mestrado, IFQSC, 1992.

[89] M. A. R. Souza. Propriedades eletrônica de um poço duplo assimétrico com dopagem delta. Dissertação de Mestrado, IFQSC, 1994.

[90] X. Aymerich-Humet, F. Serra-Mestres, and J. Millán. A generalized approximation of the Fermi-Dirac Integrals. J. Appl. Phys., **4**(5), 2850, 1983.

[91] M. Goano. Series expansion of the Fermi-Dirac Integral $F_j(x)$ over the entire domain of real j and x. Solid-State Electronics, **36**(2), 217, 1993.

[92] M. T. Abuelman'atti. Approximations for the Fermi-Dirac Integrals $F_j(x)$. Solid-State Electronics, **37**(7), 1367, 1983.

[93] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. Solid State Physics. Saunders College, Philadelphia, 1976.

[94] J. M. Ziman. Principles of the theory of solids. Cambridge University Press, second edition, 1972.

[95] M. H. Degani and J. P. Leburton. A transport model for a two-dimensional lateral-surface-superlattices. Surface Science, **236**, 179, 1992.

[96] T. Ohtoshi et al. A two-dimensional device simulator of semiconductor laser. Solid-State Electronics, **30**(6), 627–638, 1987.

[97] H. Mizuta, K. Yamaguchi, M. Yamane, T. Tanoue, and S. Takahashi. Two-dimensional numerical simulation of Fermi-level pinning phenomena due to DX centers in AlGaAs/GaAs HEMT's. IEEE Transactions On Electron Devices, **36**(10), 2307, 1989.

[98] L. Hedin and B. I. Lundqvist. Explicit local exchange-correlation potential. J. Phys. C, **4**, 2064, 1971.

[99] D. G. Liu, T. C. Chin, C. P. Lee, and H. L. Hwang. Analysis of several High-Electron-Mobility-Transistor structures by a self-consistent method. Solid-State Electronics, **33**(3), 253, 1991.

[100] S. Trott, V. Nakov, G. Gobsch, and R. Goldhahn. Modelling of the electronic structure for an AlGaAs/GaAs/AlGaAS HFET with a δ-doping layer inside the quantum well. Solid-State Electronics, **36**(6), 851, 1993.