UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE *FIOS QUÂNTICOS* GERADOS POR DISTRIBUIÇÃO DE CARGA ESPACIAL.

ALEXANDRE MARLETTA

USP / IFQSC / SBI
8-2-001144

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, USP, para a obtenção do Título de Mestre em Ciências - Física Básica.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

SÃO CARLOS

1997

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Marletta, Alexandre
Estrutura eletrônica de *fios quânticos* gerados por distribuição de carga espacial / Alexandre Marletta. - São Carlos, 1997.
47p.

Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, 1997.

Orientador: Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior

1. Estrutura eletrônica. 2. Fios quanticos.

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 DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **ALEXANDRE MARLETTA** APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 07 DE MARÇO DE 1997.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Lidério C. Ioriati Jr.(IFSC-USP)

Prof. Dr. José Antonio Brun (UNICAMP)

Prof. Dr. Nelson Studart Filho (UFSCar)

A CARLA E AOS MEUS PAIS, PAULO E ROSA, PELO INCENTIVO, COMPREENSÃO E PACIÊNCIA.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Lidério Citrângulo Ioriatti Junior pela orientação, apoio, amizade e confiança necessária para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof. Francisco E. G. Guimarães pelas críticas construtivas e apoio na continuação deste trabalho.

Ao amigo Virgílio pelas discussões e dúvidas tiradas.

Ao Bruno O. T. Rosa pela amizade e auxilio técnico com os microcomputadores.

À Ester pela sua eficiência e amizade.

Às bibliotecárias do IFSC pelo auxílio e paciência durante o período de pesquisa bibliográfica.

Aos amigos de pós-graduação: Débora, Salviano, Manzoli, Márcio, Domingos, Reginaldo, Paulo e Viviane, Luiz, Diógenes, José Paulo, Gabriel, Marconi, Claudia, Maria, Fernando, Marcos e Silvia, Cleber e João Victor pelo convívio e incentivo.

Este trabalho contou com o apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS ii

LISTA DE TABELAS vi

RESUMO ix

ABSTRACT x

1 INTRODUÇÃO 1

2 O MODELO TEÓRICO 6

2.1 TEOREMA DE KOHN-HOHEMBERG 7

2.2 PRINCÍPIO VARIACIONAL 8

2.3 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI 9

2.4 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA 13

2.5 AS EQUAÇÕES DE KOHN-SHAM 14

3 CÁLCULO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE *FIOS QUÂNTICOS* ISOLADOS 17

3.1 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA 18

3.2 AS EQUAÇÕES DE KOHN-SHAM 21

3.3 ESTADO FUNDAMENTAL (T=0K) 25

3.3.1 APROXIMAÇÃO DE FIO IDEAL 25

3.3.2 DIFUSÃO DE DOPANTES 30

3.3.3 DENSIDADE RESIDUAL DE ACEITADORES 34

3.4 ESTRUTURA ELETRÔNICA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA 41

4 CONCLUSÕES 43

5 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 48

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 3

Formação de *fios quânticos* na face (100) do GaAs, com incorporação do Si no lugar do Ga e continuação do crescimento eptaxial após a dopagem tipo δ. (a) Seção transversal com incorporação de Si nas vizinhanças dos degraus que delimitam os planos vicinais na face (100) do GaAs e (b) representação idealizada dos planos vicinais em função do ângulo α e do parâmetro de rede cristalina **a**.

Figura 1.2 4

Modelo idealizado de *fios quânticos* isolados, onde os dopantes são descritos por uma distribuição retilínea unidimensional na forma de um cilindro.

Figura 3.1 20

Representação gráfica das soluções possíveis da equação (3.1), onde (i) excesso de cargas positivas, (ii) sistema neutro e (iii) excesso de cargas negativas.

Figura 3.2 27

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = .78 \times 10^6$ doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Figura 3.3 28

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e

densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Figura 3.4 29

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Figura 3.5 31

Potencial efetivo na aproximação de TF para difusão de dopantes na forma cilíndrica e gaussiana para fios com $r'_{DQW} = r_{DQW}$ = 50 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm.

Figura 3.6 32

Potencial efetivo na aproximação de TF para difusão de dopantes na forma cilíndrica para r'_{DQW} = 20 Å, 40 Å, 60 Å, 80 Å e 100 Å com: r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm. No detalhe (*inset*), o raio médio da distribuição eletrônica em função de r'_{DQW} para as distribuições cilíndrica e gaussiana de dopantes.

Figura 3.7 33

Níveis de energia, na aproximação de difusão de dopantes cilíndrica E_{mk} e gaussiana Eg_{mk}, e número relativo de elétrons em cada sub-banda, na aproximação cilíndrica, em função de r'_{DQW} com r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Figura 3.8 34

Níveis de energia calculados nas aproximações de TF-Schrödinger, Hartree e LDA para a distribuição gaussiana de dopantes em função de r'_{DQW}, com r_{DQW} = 50 Å e $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm.

Figura 3.9 35

Potencial efetivo no estado fundamental do sistema (T=0K) de *fios quânticos* isolados na forma cilíndrica de r_{DQW} = 50 Å com incorporação de uma densidade de aceitadores uniformemente distribuída no volume do semicondutor.

Figura 3.10 37

Representação idealizada de uma super-rede de *fios quânticos* isolados, que na escala da camada de depleção podem ser considerados uma estrutura do tipo tipo δ-dopada planar $d << l_a$.

Figura 3.11 38

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, $\lambda = .78 \times 10^6$ doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Figura 3.12 39

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Figura 3.13 **40**

Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Figura 3.14 **40**

Potencial efetivo em função da temperatura na aproximação de TF para um fio de r_{DQW} = 50 Å, λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm e $V_{ef}(T, r_o) = 0$.

Figura 3.15 **41**

Raio médio $\langle r \rangle$ da distribuição eletrônica em função da temperatura, do raio dos fios r_{DQW} e de λ. Todas as curvas foram ajustadas com uma relação polinomial quadrática tal que $\langle r \rangle \propto T^2$.

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.I 27

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6 doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 3.II 28

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 3.III 29

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ = 7.8 10^6 doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 3.IV 38

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 3.V 39

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 3.VI 40

Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

Tabela 4.I 44

Diferenças percentuais nos níveis de energia para as principais sub-bandas eletrônicas, entre as aproximação de TF-Schrödinger, Hartree e LDA para fios com: λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Tabela 4.II 45

Tempo de CPU gasto em segundos para as aproximações de TF, Hartree e LDA para fios com: r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$, utilizando uma estação de trabalho Digital DECSTATION 3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz.

Tabela 4.III **46**

Porcentagem de elétrons depletados para fios com: r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm e d = 200 Å.

Tabela 4.IV **47**

Tempo de CPU gasto em segundos para a aproximação de TF para fios com: r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm $n_a(r) = 0$, utilizando uma estação de trabalho Digital DECSTATION 3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

RESUMO

Neste trabalho investigamos a estrutura eletrônica de *fios quânticos* formados por distribuição de carga espacial, obtidos a partir da incorporação de dopantes nos degraus que delimitam planos vicinais em semicondutores. Estudos experimentais recentes, que combinam o crescimento epitaxial em planos vicinais (terraços) sobre o GaAs com a técnica de dopagem planar abrupta, sugerem que a incorporação do dopante (Silício) ocorre preferencialmente ao longo das linhas que delimitam os planos vicinais deste semicondutor.

Baseados em resultados teóricos recentes, que sugerem que a aproximação semiclássica de Thomas-Fermi é capaz de reproduzir o potencial auto-consistente de sistemas eletrônicos criados a partir de distribuições de carga de origem puramente espacial, vários efeitos tais como: difusão de dopantes, temperatura finita e densidade residual de aceitadores puderam ser investigados neste nível de aproximação. As equações de Kohn-Sham na aproximação de densidade local (T=0K) foram também empregadas com o propósito de avaliar-se a possível influência de efeitos de não localidade do funcional energia cinética e efeitos de muitos corpos (troca e correlação) que foram ignorados pela abordagem semiclássica.

ABSTRACT

In this work we investigate the electronic structure of space-charge quantum wires obtained via attachment of donors in misorientation steps of semiconductor vicinal surfaces. Recent experimental studies, combining eptaxial growth on GaAs (100) vicinal surfaces (terraces) with the δ-doping technique, suggests that the incorporation of Silicon donors is preferential along the lines that delimit the vicinal terraces in this semiconductor.

Based on recent theoretical results suggesting that the Thomas-Fermi is a reliable approximation for the self-consistent potential of space-charge layers, we have employed this approximation to study the possible influence of various factors such as diffusion of dopants, finite temperature and residual density of acceptors on the electronic structure of these wires. The Kohn-Sham equations, within the local density approximation (T=0K), were also solved as the propose of evaluating the influence of effects due to the non-locality of the kinectic energy densities functional and many body effects (exchange and correlaction) that were ignored in the semiclassical approximation.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento tecnológico promovido neste século pelo advento da eletrônica, consequência direta dos grandes investimentos em pesquisa básica e aplicada, levou o homem a invenção do rádio na primeira metade do século 20, permitindo assim a comunicação e difusão de informações a grandes distâncias e o início de sua odisséia no espaço, com a construção de satélites artificiais e a histórica viagem à Lua em 21 de junho de 1969. Este desenvolvimento, principal responsável pelas transformações sociais e econômicas promovidas no final deste século, possibilitou a construção de um número cada vez maior e diversificado de aparelhos eletrônicos que se tornaram indispensáveis à vida diária do homem.

A eletrônica, que é o ramo da ciência que estuda os fenômenos provocados pelo movimento dos elétrons no vácuo e nos materiais semicondutores, surgiu em 1883 com a descoberta do efeito termiônico por J. A. Edison, conhecido também como efeito Edison, que proporcionou ao engenheiro inglês Sir J. A. Fleming a invenção da primeira válvula [1]. Esta ficou conhecida como válvula termiônica ou válvula diodo (ou apenas diodo) e começou a ser usada na retificação, modulação e detecção de correntes elétricas. Cerca de 20 anos mais tarde, por volta de 1906, o engenheiro americano Lee De Forest inventou a válvula triodo (ou audion), largamente utilizada nos estágios de amplificação de aparelhos de som. Como consequência da evolução tecnológica surgiram outros tipos de válvulas entre as quais poder-se-iam citar a tetrodo e a pentodo, empregadas nos estágios de amplificação e oscilação como partes independentes, por exemplo, de um receptor de rádio. Mas a eletrônica baseada na válvula ficou limitada devido a problemas como: super aquecimento, vida útil curta, alto custo de fabricação e várias outras desvantagens técnicas.

Os primeiros passos para contornar os problemas técnicos apresentados pelas válvulas foram dados antes mesmo da segunda Guerra Mundial, onde procurava-se

novos materiais para construção de dispositivos que pudessem substituir as válvulas. Entretanto, foi apenas em 1947 que três físicos da Bell Telephone, J. Bardeen, W. Brattain e W. Schokley, deram o grande passo em direção a eletrônica moderna. Estudando as propriedades elétricas de materiais semicondutores, eles inventaram o transistor, que é um dispositivo capaz de controlar a corrente elétrica de modo semelhante a uma válvula triodo. Seu aperfeiçoamento foi dado na década seguinte, tornando-se confiável e de baixo custo. A partir desta invenção, o avanço da eletrônica acelerou-se de um modo vertiginoso. A era da miniaturização da eletrônica que veio a seguir, trouxe circuitos integrados e microprocessadores cada vez mais rápidos, contendo um crescente número de componentes.

Além destes dispositivos há uma grande variedade de outros baseados em propriedades óticas, magnéticas ou térmicas dos sólidos cristalinos envolvidos. Esta diversidade é consequência direta do acúmulo do conhecimento gerado nas atividades de pesquisa de sistemas eletrônicos que não são encontrados na natureza.

As técnicas modernas de fabricação artificial destes sólidos são cada vez mais sofisticadas e permitiram a criação de estruturas inimagináveis há uma década. Uma entre as várias técnicas capazes de fabricar estes sólidos é conhecida como crescimento Epitaxial por Feixes Moleculares (MBE) que permite, a partir de um substrato, a incorporação de monocamadas atômicas de doadores numa escala de distância da ordem de alguns parâmetros de rede cristalina. A situação particular onde essa incorporação é feita em planos atômicos bem definidos do material hospedeiro (dopagem planar abrupta) tem o efeito de quantificar [2] o movimento dos portadores livres (elétrons ou buracos) na forma de sub-bandas devido ao potencial auto-consistente gerado pela blindagem eletrônica dos dopantes ionizados. Consequentemente os níveis de energia são quantificados para o movimento dos portadores ao longo das direções normais à camada dopante e aproximadamente livres para o movimento ao longo da camada dopada. Portanto, a importância na compreensão destes sistemas do ponto de vista fundamental [3-5] e tecnológico [6] é motivada pelo efeito de confinamento dos portadores livres em dimensões espaciais menores que três, proporcionando a construção de dispositivos com características de resposta ultra-rápida, baixo consumo, alta densidade de portadores e características quânticas a altas temperaturas.

Recentemente, propostas experimentais que combinam o crescimento epitaxial em planos vicinais (terraços) e técnicas de dopagem planar abrupta (dopagem tipo δ), tem sido feitas com o propósito de obter-se sistemas unidimensionais na forma de *fios quânticos*. Embora os resultados ainda não permitam concluir pela realização experimental [7-9] deste tipo de nano-estrutura, eles representam evidências claras de que há uma substancial incorporação de dopantes, Silício (Si) no lugar do Gálio (Ga), nas vizinhanças dos degraus que delimitam os planos vicinais, por exemplo, naqueles originados a partir da face (100) de cristais de Arsenieto de Gálio (GaAs), representado na figura 1.1.

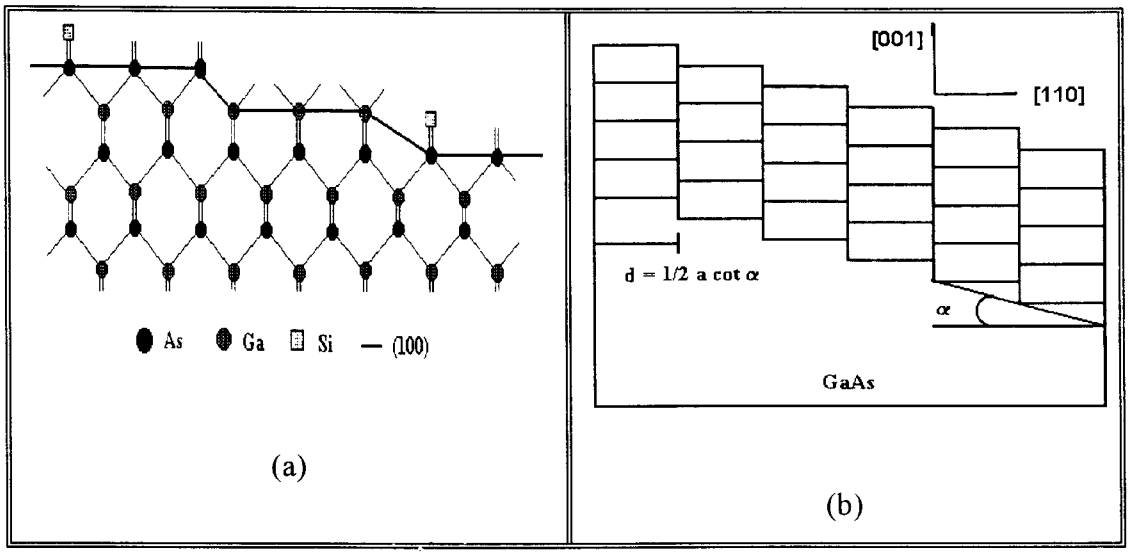

Figura 1.1. Formação de *fios quânticos* na face (100) do GaAs, com incorporação do Si no lugar do Ga e continuação do crescimento eptaxial após a dopagem tipo δ. (a) Seção transversal com incorporação de Si nas vizinhanças dos degraus que delimitam os planos vicinais na face (100) do GaAs e (b) representação idealizada dos planos vicinais em função do ângulo α e do parâmetro de rede cristalina **a**.

Motivados por essa perspectiva, apresentamos neste trabalho uma investigação teórica sistemática da estrutura eletrônica de *fios quânticos* isolados. Deve-se entender por fios isolados a situação física onde a distância **d** entre os mesmos é suficientemente grande para que não haja efeito de tunelamento entre eles. Esta condição, que será verificada no capítulo 3, é obtida para o ângulo α na figura

1.1.b suficientemente pequeno, da ordem de 0.5° a 1°, o que implica em **d** da ordem de 340 Å a 160 Å respectivamente. A investigação destas estruturas foram feitas a partir de uma situação ideal apresentada na figura 1.2, na qual dopantes são descritos por uma distribuição retilínea unidimensional na forma de um cilindro e uma situação mais realística, onde é introduzida difusão de dopantes e densidade residual de aceitadores (incorporadas durante o crescimento no processo de MBE de forma não intencional).

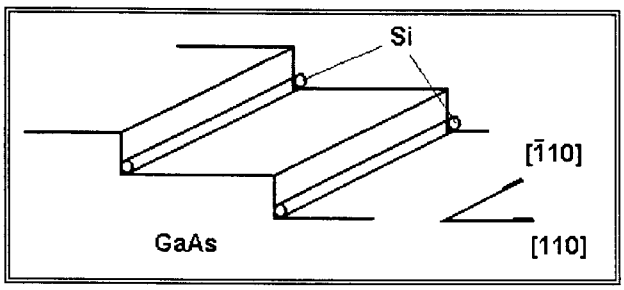

Figura 1.2. Modelo idealizado de *fios quânticos* isolados, onde os dopantes são descritos por uma distribuição retilínea unidimensional na forma de um cilindro.

O cálculo da estrutura eletrônica apresentado neste trabalho, está baseado em resultados teóricos recentes [3-5] que sugerem que a aproximação semiclássica de Thomas-Fermi, na aproximação de massa efetiva, é capaz de reproduzir quantitativamente o potencial auto-consistente de sistemas eletrônicos criados a partir de distribuições de carga de origem puramente espacial. Tendo a virtude de ser implementado sem uma excessiva demanda computacional, tal aproximação permitiu que efeitos como influência da largura e concentração da distribuição de dopantes, temperatura finita e formação de super-redes pudessem ser investigados sistematicamente. De modo mais complexo [10], as equações de Kohn-Sham foram empregadas, com o propósito de avaliar a possível influência de efeitos de troca e correlação eletrônica e não localidade do funcional energia cinética que foram ignorados pela abordagem semiclássica.

No capítulo seguinte serão desenvolvidos os conceitos básicos da aproximação semiclássica de Thomas-Fermi em função da temperatura e as equações de Kohn-Sham para o estado fundamental, que serão utilizadas na determinação da estrutura eletrônica de *fios quânticos* isolados. Os resultados destes cálculos serão apresentados no capítulo 3 e as conclusões no capítulo 4.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

CAPÍTULO 2

O MODELO TEÓRICO

Nas últimas décadas a teoria do funcional densidade (TFD) tem sido uma poderosa técnica para descrição de sistemas eletrônicos (átomos, moléculas e sólidos) em seu estado fundamental. O seu desenvolvimento foi realizado a partir de resultados mais básicos como:

a) a teoria estatística de Thomas-Fermi (TF) [11] que estendeu as relações pertinentes a um gás de elétrons homogêneo para um gás de elétrons não homogêneo em 1927 e 1928, passo inicial para estabelecer a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ como variável básica do problema;

b) o teorema de Kohn-Hohenberg (KH) [14], proposto em 1964, demonstrando que o perfil de densidade eletrônica $n(\vec{r})$ determina todos as propriedades do estado fundamental do gás de elétrons não homogêneo de forma unívoca;

c) o princípio variacional Rayleigh-Ritz (RR), garantindo que o funcional energia é mínimo se $n(\vec{r})$ for a densidade eletrônica associada ao estado fundamental $|\Psi\rangle$ do sistema;

d) as equações de Kohn-Sham (KS) [15] propostas em 1965, desenvolvendo assim a TFD como um método útil e prático para estudar-se o problema do gás de elétrons não homogêneo.

A seguir são apresentados os conceitos básicos que levaram o desenvolvimento da TFD que serão aplicados na determinação da estrutura eletrônica dos *fios quânticos* estudados neste trabalho. Uma revisão completa e aprofundada a respeito desta teoria pode ser encontrada com maiores detalhes nas referências 11 a 13.

2.1 O TEOREMA DE KOHN-HOHENBERG.

O Hamiltoniano de um gás elétrons interagindo através do potencial eletrostático Coulombiano e sob a influência de um potencial externo $V(\vec{r})$, que determina o sistema físico, é dado por:

$$H = T + V + U \tag{2.1}$$

onde,

$$T \equiv \int \nabla \psi^{\dagger}(\vec{r}) \nabla \psi(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.2}$$

$$V \equiv \int V_{ext}(\vec{r}) \psi^{\dagger}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.3}$$

$$U \equiv \frac{1}{2} \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \psi^{\dagger}(\vec{r}) \psi^{\dagger}(\vec{r}\,') \psi(\vec{r}\,') \psi(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}\,' \tag{2.4}$$

em unidades atômicas e

$$n(\vec{r}) \equiv \langle \Psi | \psi^{\dagger}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) | \Psi \rangle \tag{2.5}$$

onde os $\psi's$ representam operadores de campo e $n(\vec{r})$ a densidade eletrônica associada ao estado fundamental $|\Psi\rangle$ do sistema.

Supondo que seja conhecida a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ do estado fundamental deste sistema, imediatamente surge a seguinte questão; conhecido $n(\vec{r})$ é possível determinar de forma unívoca $V_{ext}(\vec{r})$? O teorema de KH [14] trata exatamente desta questão, mostrando que $n(\vec{r})$ determina $V_{ext}(\vec{r})$ e vice versa. A prova deste teorema é desenvolvida via *reductio ad absurdum*, tendo como base o princípio variacional de RR, demonstrando assim que a densidade eletrônica é a variável básica do problema de um gás de elétrons não homogêneo.

2.2 O PRINCÍPIO VARIACIONAL.

Se $n(\vec{r})$ é a densidade associada ao estado fundamental $|\Psi\rangle$ de muitos corpos, devido a algum potencial externo $V_{ext}(\vec{r})$, então define-se o funcional universal $F[n(\vec{r})]$ [14,15] para um número arbitrário de partículas e independente do potencial externo, dado pela seguinte expressão:

$$F[n(\vec{r})] = \frac{1}{2}\int\int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} d\vec{r}d\vec{r}\,' + G[n(\vec{r})] \tag{2.6}$$

onde, $G[n(\vec{r})]$ também é um funcional universal e sua forma funcional é:

$$G[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + E_{xc}[n(\vec{r})] \tag{2.7}$$

sendo $T[n(\vec{r})]$ o funcional energia cinética do sistema eletrônico não interagente e $E_{xc}[n(\vec{r})]$ o funcional energia de troca e correlação do sistema eletrônico interagente.

O funcional energia deste sistema é portanto dado por:

$$E[n(\vec{r})] = \int V_{ext}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + F[n(\vec{r})] \tag{2.8}$$

e o valor esperado para a energia do estado fundamental de N elétrons é:

$$E_o[|\Psi\rangle] \equiv \langle\Psi|H|\Psi\rangle \tag{2.9}$$

que pelo princípio variacional de RR, é mínimo se $n(\vec{r})$ for a densidade do estado fundamental $|\Psi\rangle$ do sistema, ou seja,

$$E_o[|\Psi\rangle] < E_o[|\Psi'\rangle] \tag{2.10}$$

sujeito ao vínculo de que o número de partículas no sistema é fixo:

$$N[n(\vec{r})] \equiv \int n(\vec{r})d\vec{r} = N \tag{2.11}$$

Portanto, uma vez conhecido o funcional $F[n(\vec{r})]$, o problema da determinação da energia do estado fundamental, equação (2.9), reside na minimização do funcional energia, equação (2.8), sujeito ao vínculo de que o número de elétrons é fixo, i. é:

$$\delta E[n(\vec{r})] - \mu \int \delta n(\vec{r}\,')d\vec{r}\,' = 0 \tag{2.12}$$

onde μ é um multiplicador de Lagrange. A complexidade deste problema está em determinar o funcional $F[n(\vec{r})]$, o qual permite obter a energia do estado fundamental do sistema. A aproximação mais simples para este funcional é a de TF, que será apresentada a seguir. Aproximações mais sofisticadas como aquelas representadas pelas equações de KS (que incluem as aproximações de Hartree e Hartree-Fock, esta última através da parametrização do termo de troca e correlação $E_{xc}[n(\vec{r})]$) serão apresentadas posteriormente na seção 2.5.

2.3 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI.

A aproximação semiclássica de Thomas-Fermi [11] é baseada nos seguintes domínios de validade: (a) que a densidade eletrônica, ou o potencial externo que a gera, varia suavemente sobre um comprimento de onda eletrônico característico do sistema e (b) no limite estatístico de muitos elétrons (alta densidade). Nesta aproximação a descrição do gás de elétrons não homogêneo é feita supondo que a densidade eletrônica local, ou o potencial local, varia suavemente de tal modo que se possa aplicar as relações de um gás de elétrons homogêneo.

No estado fundamental de um sistema de N elétrons livres, os orbitais ocupados podem ser representados por pontos no interior de uma esfera no espaço dos vetores de onda $\vec{k}$, cuja energia é dada pela equação (2.13).

$$e = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{2.13}$$

onde $k \equiv |\vec{k}|$. Elétrons com energia na superfície da esfera, **energia de Fermi** e_F, possuem vetor de onda, **vetor de onda de Fermi** k_F, tal que pela equação (2.13) obtêm-se a seguinte relação:

$$e_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \tag{2.14}$$

O número de elétrons N contidos nesta esfera é, deste modo, dado pela razão entre o volume V ocupado pelo gás e a densidade de estados, o que resulta em:

$$N = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \tag{2.15}$$

Assim, a densidade de elétrons n, a partir da equação (2.15), está indicada na equação abaixo.

$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \tag{2.16}$$

e k_F em função da densidade n é dado por:

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3} \tag{2.17}$$

USC -- SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Substituindo a equação (2.17) na equação (2.14) obtêm-se que a energia dos elétrons na superfície de Fermi, em função da densidade eletrônica, é dada pela equação (2.18).

$$e_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \tag{2.18}$$

Entretanto, a energia cinética t do gás de elétrons é igual ao valor médio da energia total $\bar{e}$ do mesmo. Deste modo, t será dado pela seguinte expressão:

$$t = \bar{e} = \frac{\int e(\vec{k})d^3\vec{k}}{\int d^3\vec{k}} = \frac{\int_0^{k_F}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{\hbar^2}{2m} k^4 dk d\varphi d\theta}{\int_0^{k_F}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} k^2 dk d\varphi d\theta} = \frac{3}{5} e_F \tag{2.19}$$

onde $\vec{k} \equiv \left(k_x, k_y, k_z\right)$ e das equações (2.18) e (2.19) obtêm-se t em função de n:

$$t = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \tag{2.20}$$

Considerando o potencial externo como uma função que varie suavemente (hipotese do problema), entre $\vec{r}$ e $\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}$ é aproximadamente constante, a energia cinética dT dos dN elétrons neste domínio é dado por $t\,dN$, onde $dN = n\,d^3\vec{r}$. Assim a energia cinética total será dada pela equação (2.21).

$$T\left[n(\vec{r})\right] = \int t(\vec{r})n(\vec{r})d^3\vec{r} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\int\left[3\pi^2 n(\vec{r})\right]n(\vec{r})d^3\vec{r} \tag{2.21}$$

O que demonstra a forma funcional da energia cinética devido a estatística de Thomas-Fermi, que em unidades atômicas, assume a seguinte forma funcional:

$$T[n(\vec{r})] = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}\int [n(\vec{r})]^{5/3} d\vec{r} \tag{2.22}$$

Ainda, nesta aproximação tem-se que o termo de troca e correlação é nulo (aproximação de Hartree), ou seja, $E_{xc}[n(\vec{r})] = 0$.

Portanto, a forma funcional de $F[n(\vec{r})]$ dado pela equação (2.6) está completamente determinada:

$$F[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + \frac{1}{2}\int\int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} d\vec{r}d\vec{r}\,' \tag{2.23}$$

Pelo princípio variacional, a energia do estado fundamental será dada pela minimização do funcional energia $E[n(\vec{r})]$ através das equações (2.8) e (2.12). O cálculo da energia potencial efetiva $V_{ef}(\vec{r})$ é obtida através da solução da equação de Euler-Lagrange (2.12), juntamente com a equação de Poisson, o que resulta na seguinte equação:

$$\nabla^2 V_{ef}(\vec{r}) = -\frac{8}{3\pi}\left[\mu - V_{ef}(\vec{r})\right]^{3/2} + 8\pi n_{ext}(\vec{r}) \tag{2.24}$$

onde, $n_{ext}(\vec{r})$ representa a densidade externa ao gás de elétrons e

$$V_{ef}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int \frac{n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} d\vec{r}\,' \tag{2.25}$$

em unidades atômicas. Deste modo tem-se uma relação direta entre $V_{ef}(\vec{r})$ e $n(\vec{r})$,

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2}\left[\mu - V_{ef}(\vec{r})\right]^{3/2} \tag{2.26}$$

2.4 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA.

No cálculo da estrutura eletrônica, a densidade de elétrons da banda de condução em equilíbrio térmico é dada por:

$$n(\vec{r},T) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{2.27}$$

onde, na aproximação de TF, a função densidade de estados $g(\varepsilon)$ tridimensional é dada por:

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} \dfrac{m^*}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\dfrac{2m^* \varepsilon}{\hbar^2}}, & \text{se } \varepsilon \geq 0 \\ 0 & , \text{se } \varepsilon < 0 \end{cases} \tag{2.28}$$

e $f(\varepsilon)$ a função distribuição de Fermi-Dirac,

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon - \mu_{ef}(\vec{r})}{K_B T}\right) + 1} \tag{2.29}$$

onde K_B é a constante de Boltzman e $\mu_{ef}(\vec{r}) = \mu - V_{ef}(\vec{r})$. Deste modo, substituindo as expressões (2.28) e (2.29) na expressão (2.27) em unidades atômicas obtêm-se:

$$n(\vec{r},T) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{\beta^{3/2}} F_{1/2}(x) \tag{2.30}$$

onde, $\beta = 1/K_B T$ e

$$F_{1/2}(x) = \int_0^{+\infty} \frac{t^{1/2}}{\exp(t-x)+1} dt \tag{2.31}$$

é a integral de Fermi-Dirac com $t = \beta\varepsilon$ e $x = \beta\mu_{ef}(\vec{r})$. A integral (2.31) não possui solução analítica, mas felizmente pode ser resolvida numericamente de modo simples e com grande precisão [16]. Portanto, a equação correspondente a (2.24) é:

$$\nabla^2 V_{ef}(\vec{r}) = -\frac{4}{\pi\beta^{3/2}} F_{1/2}(x) + 8\pi n_{ext}(\vec{r}) \tag{2.32}$$

onde $n(\vec{r})$ e $V_{ef}(\vec{r})$ estão relacionados diretamente pela equação (2.30). O caso anterior (2.24) pode ser obtido de (2.32) tomando $\beta \to \infty$.

2.5 AS EQUAÇÕES DE KOHN-SHAM.

As equações de KS [15] são, na prática, o resultado mais importante para resolver-se o problema de minimizar o funcional energia $E[n(\vec{r})]$ de forma auto-consistente. Para o estado fundamental não degenerado, o funcional a ser minimizado é dado pela seguinte expressão:

$$E[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + \int V_{ext}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2}\int\int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} d\vec{r} d\vec{r}\,' + E_{xc}[n(\vec{r})] \tag{2.33}$$

que deve ser minimizado em relação à $n(\vec{r})$, sujeito ao vínculo de que o número de elétrons no sistema é fixo,

$$N = \int n(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.34}$$

Deste modo, pelas equações (2.33) e (2.34) e as condições (2.12) obtêm-se:

$$\frac{\delta T[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r}\,')} + V_{ef}[n(\vec{r})] - \mu = 0 \tag{2.35}$$

onde μ é um multiplicador de Lagrange associado a condição (2.34) e

$$V_{ef}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \tag{2.36}$$

tal que,

$$V_{xc}[n(\vec{r})] = \frac{\delta E_{xc}[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r}\,')} \tag{2.37}$$

e $V_H(\vec{r})$ o potencial de Hartree:

$$V_H(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int \frac{n(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} d\vec{r}\,' \tag{2.38}$$

Dados $V_{ef}(\vec{r})$ e μ, a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ é calculada a partir da solução da equação de Schrödinger independente do tempo de uma partícula,

$$\left\{\nabla^2 + V_{ef}(\vec{r}) - E_i\right\}|\psi_i\rangle = 0 \tag{2.39}$$

e portanto,

$$n(\vec{r}) = 2\sum_{i=1}^{N} \langle \psi_i | \psi_i \rangle \tag{2.40}$$

onde o fator 2 é devido a degenerescência de spin e N o número de elétrons do sistema. Assim, as equações (2.36) a (2.40) devem ser resolvidas auto-consistentemente. Para resolver estas equações é necessário ter-se o conhecimento do funcional energia de troca e correlação $E_{xc}[n(\vec{r})]$. No limite em que a densidade

eletrônica $n(\vec{r})$ varia suavemente, KS [15] deduziram uma forma simples para este funcional que ficou conhecido como aproximação de densidade local (LDA):

$$E_{xc}^{LDA} = \int n(\vec{r})\varepsilon_{xc}[n(\vec{r})]d\vec{r} \tag{2.41}$$

onde $\varepsilon_{xc}[n(\vec{r})]$ é a energia de troca e correlação de um gás de elétrons uniforme de densidade $n(\vec{r})$. Deste modo das equações (2.37) e (2.41) obtêm-se:

$$V_{xc}[n(\vec{r})] = \mu_{xc}[n(\vec{r})] \tag{2.42}$$

tal que $\mu_{xc}[n(\vec{r})]$ é o potencial químico do gás de elétrons uniforme, cuja forma analítica, proposta por Hedin e Lundqvist [17], é dada por:

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{-2}{\pi\alpha r_s}\left[1 + B\,X\ln\left(1 + {}^{1}\!/_{X}\right)\right] \tag{2.43}$$

onde $X = \frac{r_s}{21}$, $\alpha = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/3}$, $B = 0.7734$ e $r_s = \left[\frac{4\pi a_o^{*3} n(\vec{r})}{3}\right]^{-1/3}$, com a_o^* sendo o raio de Bohr efetivo.

CAPÍTULO 3

CÁLCULO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE *FIOS QUÂNTICOS* ISOLADOS

Neste capítulo serão apresentados os cálculos da estrutura eletrônica de *fios quânticos* isolados. Nestes cálculos serão feitas as seguintes aproximações:

a) a distribuição de doadores com simetria radial, tanto no caso ideal onde o fio é aproximado por um cilindro (como o da figura 1.2), quanto na situação em que há uma difusão de doadores e densidade uniforme de aceitadores;

b) os fios serão considerados infinitos em seu comprimento desprezando assim os efeitos de borda;

c) aproximação de massa efetiva e de banda parabólica;

d) a incorporação de dopantes Si no lugar do Ga não altera a estrutura de rede cristalina;

e) as escalas naturais de energia e comprimento (unidades atômicas) são o Rydberg efetivo $\left(R_y^*\right)$ e raio de Bohr efetivo $\left(a_o^*\right)$ respectivamente, que para o GaAs [10] é: $R_y^* \cong 6\ meV$ $(5.83\ meV)$ e $a_o^* \cong 100$ Å $(98.7$ Å$)$.

Das aproximações de fio infinito e densidade de doadores com simetria radial tem-se que, em coordenadas cilíndricas, a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ e o potencial $V_{ef}(\vec{r})$ que a gera dependerão apenas da coordenada radial r, o que reduz os cálculos a um problema unidimensional, trazendo a vantagem de ser implementado a um baixo custo computacional.

A seguir serão desenvolvidos as ferramentas matemáticas básicas na aproximação de TF em função da temperatura e as dadas pelas equações de KS para o estado fundamental, utilizando as aproximações anteriores. Os cálculos numérico foram feitos através do método de Runge-Kutta com erro da ordem do passo h^5, em linguagem Fortran 77, utilizando estações de trabalho do tipo Digital DECSTATION

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz. O tempo gasto no processamento numérico está indicado no capítulo 4.

3.1 APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA

Neste nível de aproximação a equação básica a ser resolvida é a dada por (2.32) (e a T = 0K pela equação (2.24)), que devido a simetria radial do problema é rescrita como:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}r\frac{d}{dr}\left[V_{ef}(r)\right] = -\frac{4}{\pi\beta^{3/2}}F_{1/2}(x) + 8\pi n_{ext}(r) \tag{3.1}$$

onde, a função $F_{1/2}(x)$ é dado pela integral (2.31) e

$$n_{ext}(r) = n_d(r) - n_a(r) \tag{3.2}$$

com $n_d(r)$ e $n_a(r)$ sendo as funções densidade de doadores e residual de aceitadores respectivamente com simetria radial. Portanto, a solução do problema está em resolver a equação (3.1), sujeita a condição de neutralidade de carga do sistema,

$$N_d = N + N_a \tag{3.3}$$

onde N_d é o número de doadores, N o número de elétrons e N_a o número de aceitadores ionizados em um elemento L de comprimento do fio. De outra maneira, considerando um elemento L de comprimento do fio, a condição (3.3) é equivalente a:

$$\int_0^{r_0} n_d(r)rdr - \int_0^{r_0}\left[n(r) + n_a(r)\right]rdr = 0 \tag{3.4}$$

sendo r_o o raio além do qual o sistema é neutro, ou seja, onde o vetor campo elétrico é nulo.

Para resolver a equação (3.1) deve-se ter conhecimento das condições iniciais e de contorno do problema em $r = 0$ e $r = r_o$ respectivamente. Pela lei de Gauss, iremos considerar uma casca cilíndrica de raio r' menor que o raio da distribuição de doadores. Então:

$$E_{ef}(r') = \frac{1}{r'}\int_0^{r'}\left[n_d(r) - n(r) - n_a(r)\right]rdr, \tag{3.5}$$

onde $E_{ef}(r')$ é o campo elétrico. Para $r' \to 0$ a densidade de doadores, elétrons e aceitadores, podem ser consideradas como aproximadamente constante. Neste caso a energia potencial em unidades atômicas, é dada por:

$$V_{ef}(r) \cong V_o + \alpha r^2 \tag{3.6}$$

com α e V_o constantes a serem determinadas. Deste modo, as condições iniciais em $r = 0$ são dadas por:

$$V_{ef}(0) = V_o \text{ e } \frac{dV_{ef}}{dr}(0) = 0 \tag{3.7}$$

o que já era de se esperar, pois não há singularidades na origem. Pela condição de neutralidade de carga (3.4), integrando a equação (3.1) para $r \in [0, r_o]$, tem-se:

$$\frac{dV_{ef}}{dr}(r_o) = 0 \tag{3.8}$$

Deste modo, a propagação da solução da equação (3.1), dada pela condição inicial (3.7) deve ser tal que satisfaça a condição de contorno (3.8) com uma única

incógnita, V_o. Portanto a equação (3.1) admite três classes de soluções em função de V_o,

i) a primeira classe de soluções representa um excesso de cargas positivas, resultando na divergência positiva do potencial, $V_{ef}(r \to r_o) \to +\infty$;

ii) a segunda classe de soluções representa uma quantidade de cargas tal que o sistema é neutro, o que implica na condição (3.8) ou $V_{ef}(r \to r_o) \to$ constante e é a solução procurada;

iii) a terceira classe representa um excesso de cargas negativas, resultando na divergência negativa do potencial, $V_{ef}(r \to r_o) \to -\infty$;

Essas soluções podem ser visualizadas graficamente na figura 3.1, com o referencial colocado em $\mu = 0$.

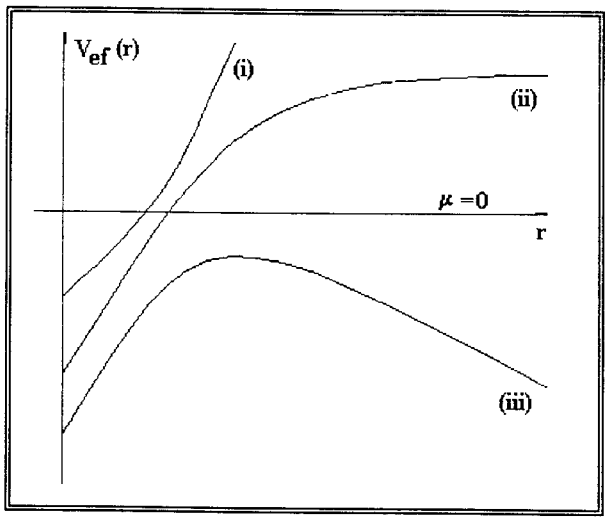

Figura 3.1. Representação gráfica das soluções possíveis da equação (3.1), onde (i) excesso de cargas positivas, (ii) sistema neutro e (iii) excesso de cargas negativas.

3.2 AS EQUAÇÕES DE KOHN-SHAM

As equações de KS, (2.36) a (2.40), devem ser resolvidas de modo auto-concistente. Para tanto deve-se fornecer, como passo inicial, uma densidade eletrônica $n(r)$ ou um potencial efetivo $V_{ef}(r)$. Nesta dissertação o passo inicial foi o potencial efetivo $V_{ef}^{TF}(r)$ resultante da aproximação de TF.

O cálculo auto-consistente é então dado então pela solução inicial da equação de Schrödinger (2.38), encontrando os estados de uma partícula $|\psi_i\rangle$, os quais fornecerão, através da equação (2.39), uma nova densidade eletrônica $n(r)$. O passo seguinte é calcular o novo potencial efetivo $V_{ef}(r)$, equação (2.36), através das equações (2.37) e (2.38), com o potencial de Hartree dado pela solução da equação de Poisson:

$$\nabla^2 V_H(\vec{r}) = 8\pi\left(n_d(\vec{r}) - n(\vec{r}) - n_a(\vec{r})\right), \tag{3.9}$$

Estes passos são repetidos até que os critérios usuais de convergência sejam satisfeitos; i. é, que a variação dos níveis de energia seja menor que um certo erro pré determinado.

Para que o processo auto-consistente convirja de forma adiabática é feita uma combinação linear do potencial efetivo de entrada $V_{ent}^{j}(r)$ (para $j = 1$, $V_{ebt}^{1}(r) = V_{ef}^{TF}(r)$) com o resultante $V_{sai}^{j}(r)$ no passo j, tal que:

$$V_{ef}(r) = V_{ent}^{j+1}(r) = \xi\, V_{ent}^{j}(r) + (1-\xi)\, V_{sai}^{j}(r) \tag{3.10}$$

com $0 \le \xi \le 1$. Deste modo, devido as aproximações feitas anteriormente para o *fio quântico* isolado, os passos a serem resolvidos são:

(a) Equação de Schrödinger independente do tempo, em unidades atômicas:

$$\left\{-\nabla^2 + V_{ef}(r) - E_i\right\}\left|\psi_i\right\rangle = 0 \tag{3.11}$$

Como o operador momento angular L_z é dado pela relação (3.12) e sabendo que na direção z, a solução é de partícula livre, a função de onda $\left|\psi_i\right\rangle$ na representação de coordenadas será dado pela expressão (3.13).

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{3.12}$$

$$\psi_{k_z}^{m,k}(r,\varphi,z) = R_{m,k}(r)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}} \tag{3.13}$$

onde $m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots$ está associado ao momentum angular, k é o número de soluções para cada m e k_z é o vetor de onda na direção do eixo z tal que, $-k_F \le k_z \le k_F$ e k_F o vetor de onda de Fermi. Assim, combinando as expressões (3.11) a (3.13) obtêm-se a seguinte equação para a parte radial $R_{m,k}(r)$ da função de onda:

$$\left\{-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}r\frac{d}{dr} + \frac{m^2}{r^2} + V_{ef}(r) - E_{m,k}\right\}R_{m,k}(r) = 0 \tag{3.14}$$

onde,

$$\int_0^{r_o} R_{m,k}^2(r)rdr = 1 \tag{3.15}$$

e a energia total:

$$E = k_z^2 + E_{m,k} \tag{3.16}$$

Novamente, para resolver a equação (3.14) deve-se ter conhecimento das condições iniciais e de contorno do problema em $r = 0$ e $r = r_o$ respectivamente. Como obtido em (3.6) o potencial para $r \to 0$ se aproxima de uma constante de tal modo que a equação (3.14) é reduzida a equação de Bessel e então,

$$R_{m,k}(r \to 0) \cong J_m(r) \tag{3.17}$$

e as condições iniciais utilizando identidades associadas as funções de Bessel são:

$$R_{m,k}(0) = J_m(0) \quad \text{e} \quad \frac{dR_{m,k}}{dr}(0) = \frac{J_{m-1}(0) - J_{m+1}(0)}{2} \tag{3.18}$$

e a condição de contorno para $r \to r_o$ é dada pela neutralidade de carga, ou seja, a probabilidade de encontrar elétrons para $r > r_o$ é nula,

$$R_{m,k}(r \geq r_o) = 0 \tag{3.19}$$

Portanto a solução da equação de Schrödinger está definida, desde que a condição de contorno (3.19) seja satisfeita. O passo seguinte é encontrar a densidade eletrônica associada as funções de onda de uma partícula (3.13).

(b) Densidade eletrônica:

A partir da equação (2.31) com $|\psi_i\rangle$ dado por (3.13), a densidade eletrônica é calculada através de:

$$n(r) = 2\sum_{m,k} \frac{R_{m,k}^2(r)}{2\pi L} \int_{-k_F}^{+k_F} \frac{L}{2\pi} dk_z \tag{3.20}$$

onde o fator 2 é devido a degenerescência no *spin* eletrônico e para o estado fundamental do sistema (T=0K) $E = \mu \Rightarrow k_z = k_F$, da relação (3.16):

$$k_F = \sqrt{\mu - E_{mn}} \tag{3.21}$$

Através das equações (3.21) e (3.20) tem-se:

$$n(r) = \frac{1}{\pi^2} \sum_{m,k} \sqrt{\mu - E_{m,k}} R_{m,k}^2(r) \tag{3.22}$$

Utilizando a condição de normalização (3.15) e neutralidade de carga (3.4), o número de elétrons por unidade de comprimento λ é dado por:

$$\lambda = \frac{N}{L} = \frac{1}{\pi^2} \sum_{m,k} \sqrt{\mu - E_{m,k}} \tag{3.23}$$

onde λ é o número de elétrons ligados ao fio por unidade de comprimento, tal que $N = N_d$ se $n_a = 0$ e $N = N_d - N^{dep}$ se $n_a \neq 0$; com N_d sendo o número de doadores e N^{dep} o número de elétrons depletados respectivamente em um comprimento L do fio. Deste modo, a equação (3.23) é uma equação transcendental que determina μ a partir de λ e do conjunto de autovalores $E_{m,k}$, dados do problema. Conhecido μ de (3.23), a densidade eletrônica (3.22) é calculada como:

$$n(r) = \sum_{m,k} n_{m,k}(r) = \frac{N}{\sum_{m,k} \sqrt{\mu - E_{m,k}}} \sum_{m,k} \sqrt{\mu - E_{m,k}} R_{m,k}^2(r) \tag{3.24}$$

onde $n_{m,k}(r)$ é a densidade eletrônica por sub-banda.

Calculada a nova densidade eletrônica resolve-se a equação de Poisson para o potencial de Hartree dado pela equação (3.9) que somando com o termo de troca e

USP – SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

correlação resulta no novo potencial efetivo, recomeçando o processo até a sua convergência.

(c) Potencial efetivo.

O potencial efetivo é dado pela soma do potencial de Hartree e o de troca e correlação. O potencial de Hartree é dado, para este problema, pela solução da equação de Poisson:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}r\frac{d}{dr}\left[V_H(r)\right] = 8\pi\left(n_d(r) - n(r) - n_a(r)\right) \tag{3.25}$$

sujeita as mesmas condições iniciais e de contorno da equação (3.1). O potencial de troca e correlação é dado pela expressão (2.43), com $n(\vec{r}) \equiv n(r)$ dado pela expressão (3.24), determinando assim $V_{sai}^{j}(r)$. Consequentemente, $V_{ef}(r)$ para o próximo passo $j+1$, é determinado pela equação (3.10) até atingir-se a convergência.

A seguir serão apresentados os resultados obtidos para os fios na aproximação de TF, Hartree $\left(E_{xc}[n(r)] = 0\right)$ e equações de KS.

3.3 ESTADO FUNDAMENTAL (T=0K)

3.3.1 APROXIMAÇÃO DE FIO IDEAL

Nesta aproximação iremos considerar fios isolados como o da figura 1.2, para os quais a densidade residual de aceitadores é nula $n_a(r) = 0$ e os dopantes são descritos por uma distribuição retilínea unidimensional uniforme de raio r_{DQW} (do inglês *Doped Quantum Wire*) descrita como:

$$n_d(r) = \begin{cases} n_d = \text{constante, se } r \le r_{DQW} \\ 0, \text{ se } r > r_{DQW} \end{cases} \tag{3.26}$$

Como a energia de Fermi é um parâmetro, por simplicidade iremos tomá-lo como o zero de energia ($\mu = 0$). As condições de contorno que garantem a neutralidade do sistema serão tomadas em r_o tal que $V_{ef}(r_o \to +\infty) = 0$.

Na prática não é possível encontrar este resultado numericamente, sendo portanto necessário truncar a propagação da solução a uma certa distância. O critério utilizado para encontrar esta distância r_o foi o de que se esta fosse dobrada os níveis de energia não se alterariam mais do que 1% de seu valor e o erro na solução numérico, tanto na aproximação de TF quanto nas aproximações de Hartree e LDA, foi menor que $1/10^8$.

Para de fios de raio $r_{DQW} = 50$ Å, nesta aproximação, foram calculadas a estrutura eletrônica para λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm (ou densidades volumétricas de doadores $n_d = 10^{18}$, 5 x 10^{18} e 10^{19} doadores/cm^3 respectivamente) na aproximação de TF, na aproximação de Hartree e LDA.

Os resultados para λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm são apresentados respectivamente nas tabelas 3.I a 3.III e graficamente nas figura 3.2 a 3.4. Nas tabelas $E_{m,k}$ são os níveis de energia e Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda. Nos gráficos os níveis de energia e densidade eletrônica por sub-banda referem-se a solução da equação de Schrödinger para o potencial efetivo na aproximação de TF.

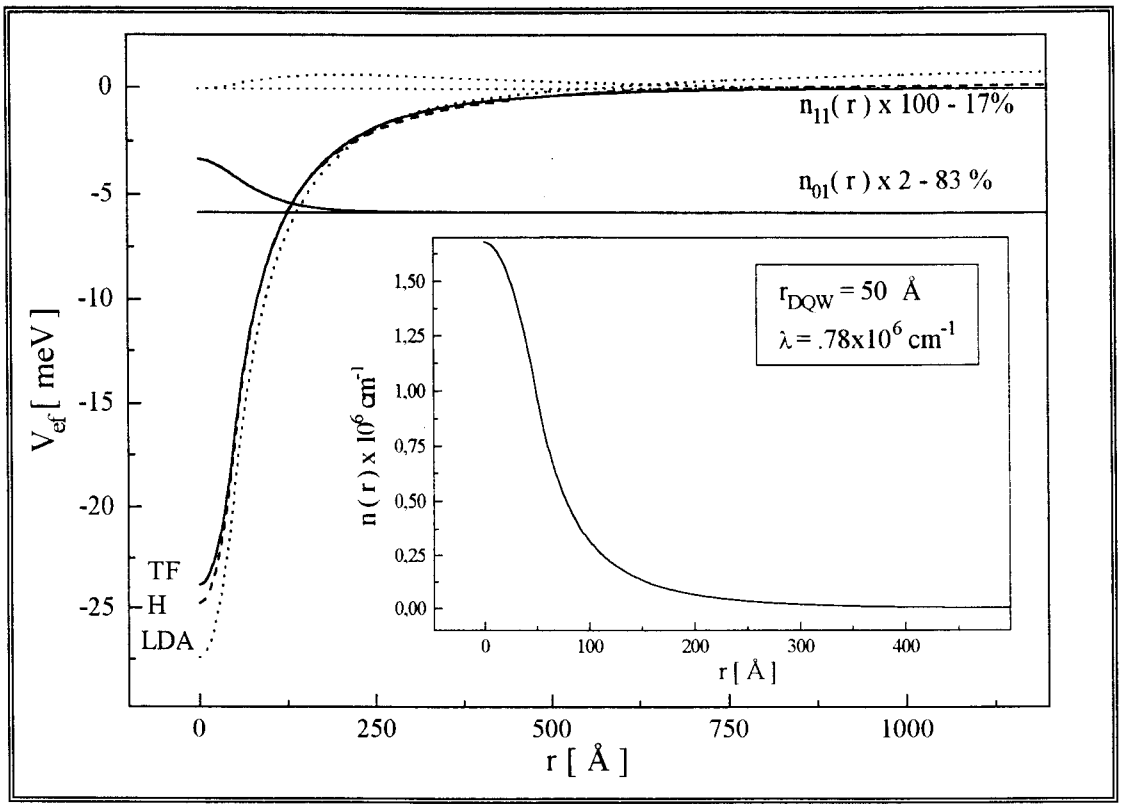

Figura 3.2. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Tabela 3.I. Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6 doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		LDA	
m,k	$E_{m,k}$ [meV]	Ne [%]	$E_{m,k}$ [meV]	Ne [%]	$E_{m,k}$ [meV]	Ne [%]
0,1	- 5.84	83.3	- 6.1	81.1	- 7.5	90.6
1,1	- 0.1	16.7	- 0.1	18.9	- 0.2	9.4
$\langle r \rangle$ [Å]	129.7		108.7		110.7	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 23.8		- 24.8		- 27.4	

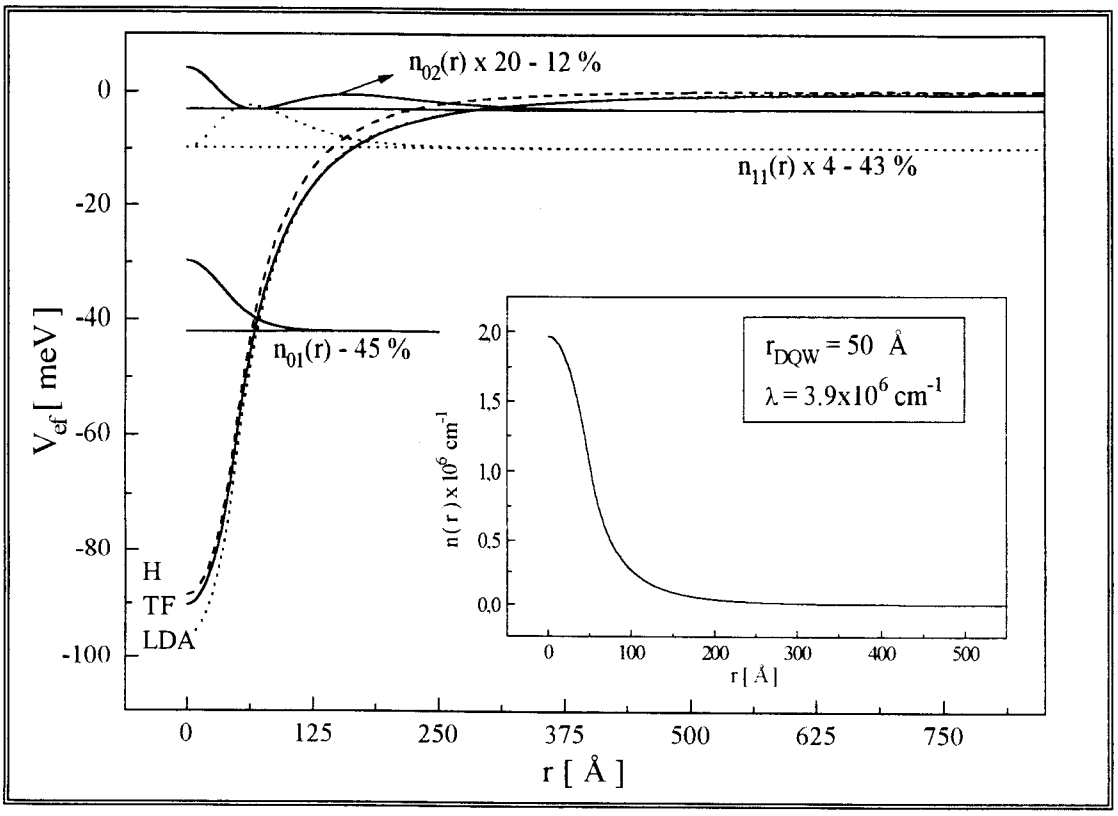

Figura 3.3. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å, $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Tabela 3.II. Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		LDA	
m,k	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]
0,1	- 42.1	44.9	- 39.8	43.5	- 45.6	44.7
0,2	- 3.1	12.0	- 1.0	13.8	- 3.2	11.9
1,1	- 9.8	43.1	- 7.0	42.7	- 10.8	43.4
$\langle r \rangle$ [Å]	108.8		104.4		98.1	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 90.2		- 88.5		- 96.0	

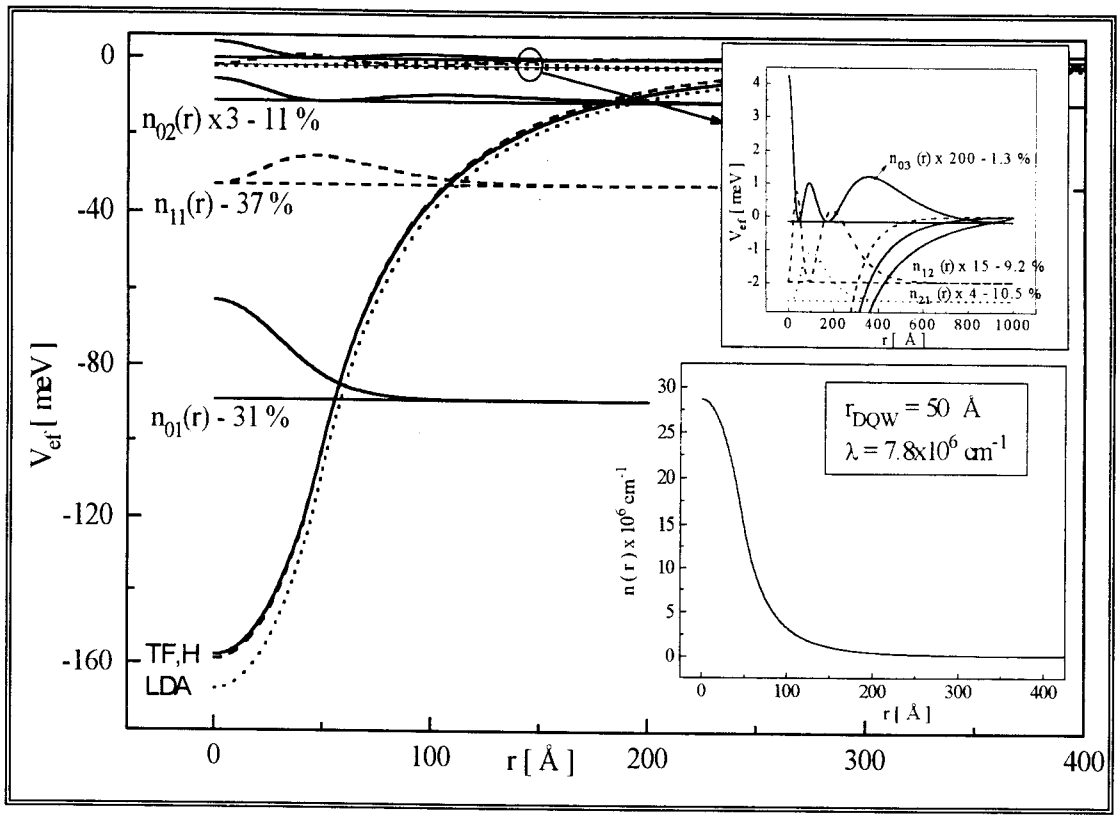

Figura 3.4. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de r_{DQW} = 50 Å , λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

Tabela 3.III. Resultados da estrutura eletrônica para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ = 7.8 x 10^6 doadores/cm, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, ⟨*r*⟩ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		LDA	
m,k	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]
0,1	- 89.4	30.7	- 88.8	31.4	- 94.3	32.1
0,2	- 11.7	11.1	- 10.2	11.3	- 11.8	11.4
0,3	- 0.4	1.3	---	---	---	---
1,1	- 33.0	37.3	- 32.1	38.3	- 35.5	39.4
1,2	- 2.2	9.2	- 0.4	8.7	- 1.03	7.1
2,1	- 2.7	10.4	- 1.0	10.3	- 2.3	10.0
⟨*r*⟩ [Å]	101.0		100.0		95.0	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 158.0		- 158.1		- 164.9	

3.3.2 DIFUSÃO DE DOPANTES

Nesta seção iremos considerar fios isolados como os da figura 1.2, tais que a densidade residual de aceitadores ainda seja nula $n_a(r) = 0$ e os dopantes descritos por uma distribuição retilínea unidimensional nas seguintes situações:

i) considerando os fios na forma cilíndrica com difusão de dopantes uniforme e densidade linear constante, $\lambda = \pi r_{DQW}^2 n_d$. Neste caso, a densidade volumétrica de doadores para um fio de raio r'_{DQW} é dada por:

$$n'_d(r) = \begin{cases} n_d \left(\dfrac{r_{DQW}}{r'_{DQW}} \right)^2, & \text{se } r \leq r'_{DQW} \\ 0, & \text{se } r > r'_{DQW} \end{cases} \tag{3.27}$$

ii) difusão de dopantes seja uma função gaussiana,

$$n'_d(r) = A \exp\left\{ -\left(\frac{r}{\sigma} \right)^2 \right\} \tag{3.28}$$

onde A é uma constante de normalização tal que o número de doadores seja sempre constante para qualquer σ,

$$A = N_d \left(\frac{r'_{DQW}}{\sigma} \right)^2 \tag{3.29}$$

onde, através do cálculo do raio médio das distribuições de dopantes acima, σ é dado por:

$$\sigma = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} r'_{DQW} \tag{3.30}$$

Para fios de raio $r_{DQW} = 50$ Å, r'_{DQW} variando no intervalo de 10 a 100 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm o potencial efetivo na aproximação de TF para a difusão de dopantes, anteriormente descritas, está apresentada na figura 3.7. A variação dos níveis de energia e o número de elétrons relativos em cada nível estão apresentados na figura 3.8, onde verifica-se que não há diferença substancial para as duas aproximações de difusão. Na figura 3.7 também mostramos o raio médio da distribuição eletrônica como função de r'_{DQW}.

Para que se tenha uma idéia quantitativa dos potenciais gerados nas aproximações para simulação da difusão de doadores na distribuição cilíndrica e na gaussiana, na figura abaixo é apresentado os potenciais para $r'_{DQW} = r_{DQW} = 50$ Å. Demonstrando assim que não há variação significativa na forma e na largura média do potencial, o que é consequência da pequena diferença encontrada nos níveis de energia.

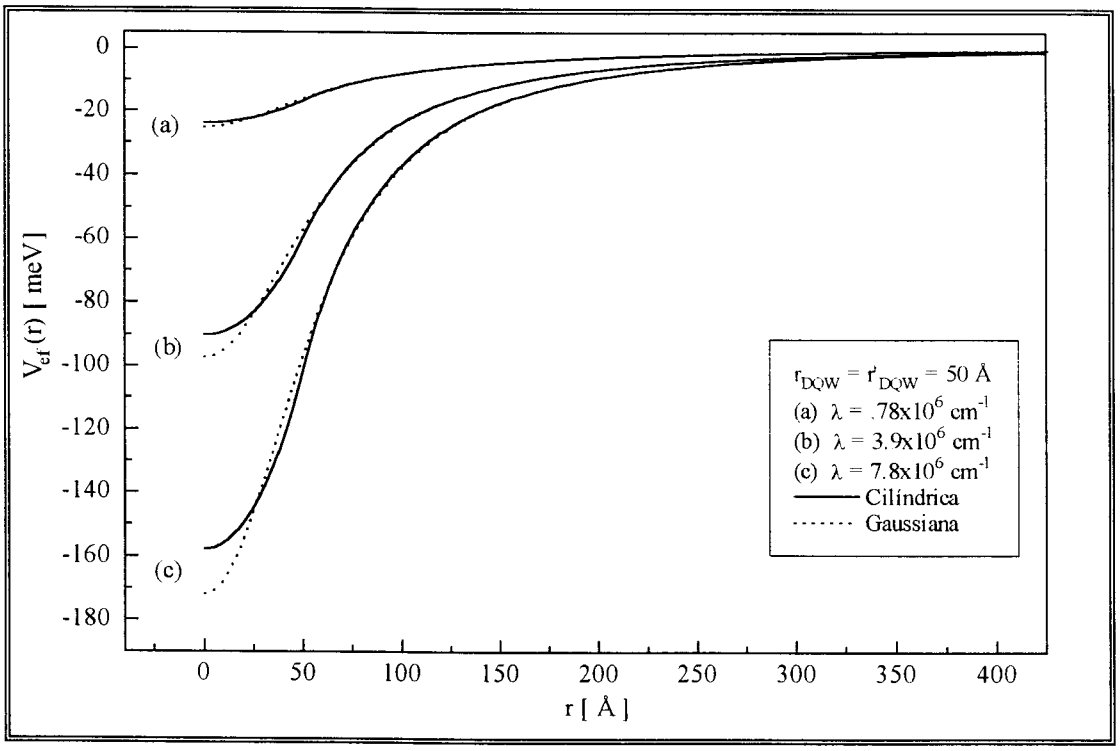

Figura 3.5. Potencial efetivo na aproximação de TF para difusão de dopantes na forma cilíndrica e gaussiana para fios com $r'_{DQW} = r_{DQW} = 50$ Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

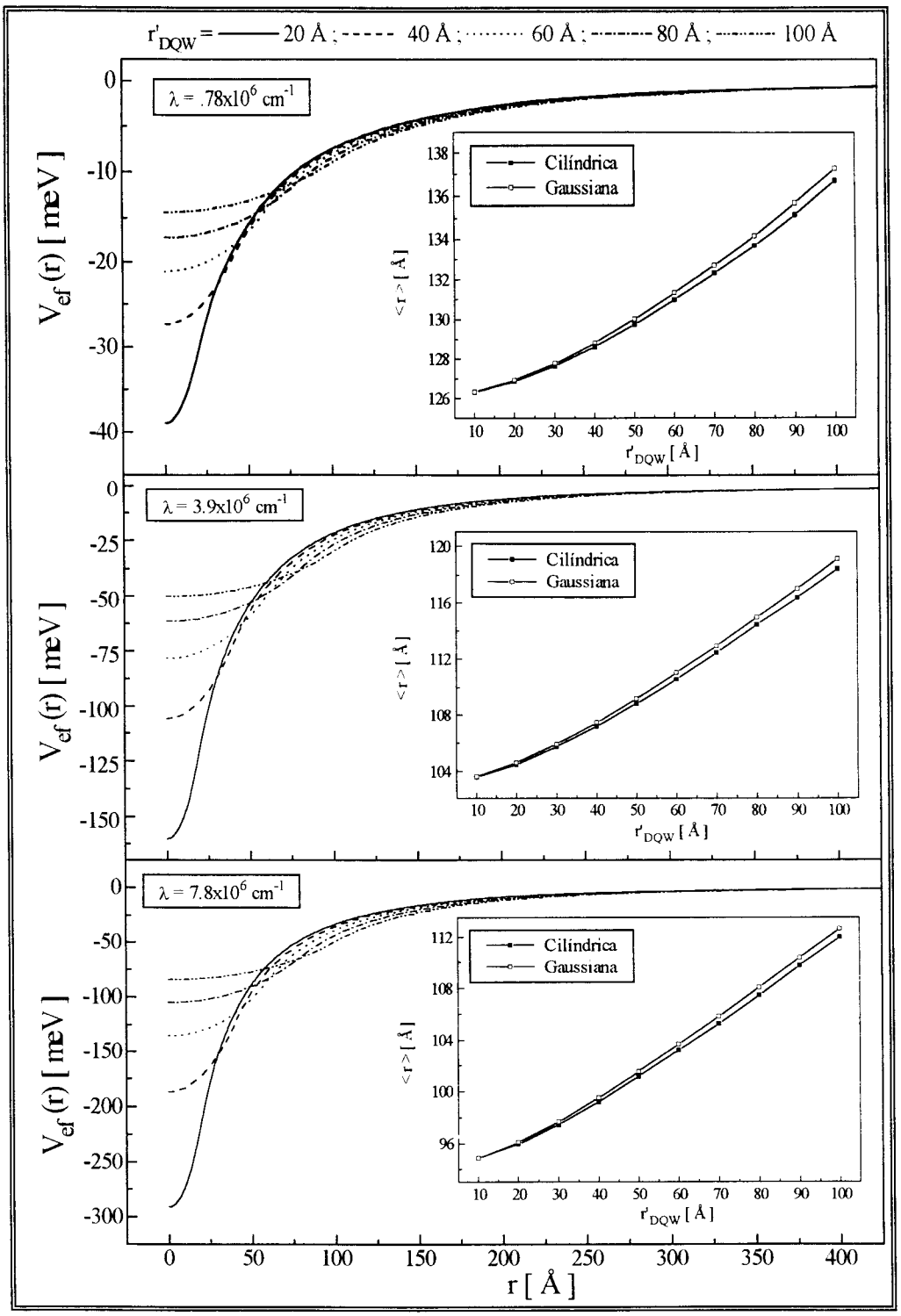

Figura 3.6. Potencial efetivo na aproximação de TF para difusão de dopantes na forma cilíndrica para r'_{DQW} = 20 Å, 40 Å, 60 Å, 80 Å e 100 Å com: r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm. No detalhe (*inset*), o raio médio da distribuição eletrônica em função de r'_{DQW} para as distribuições cilíndrica e gaussiana de dopantes.

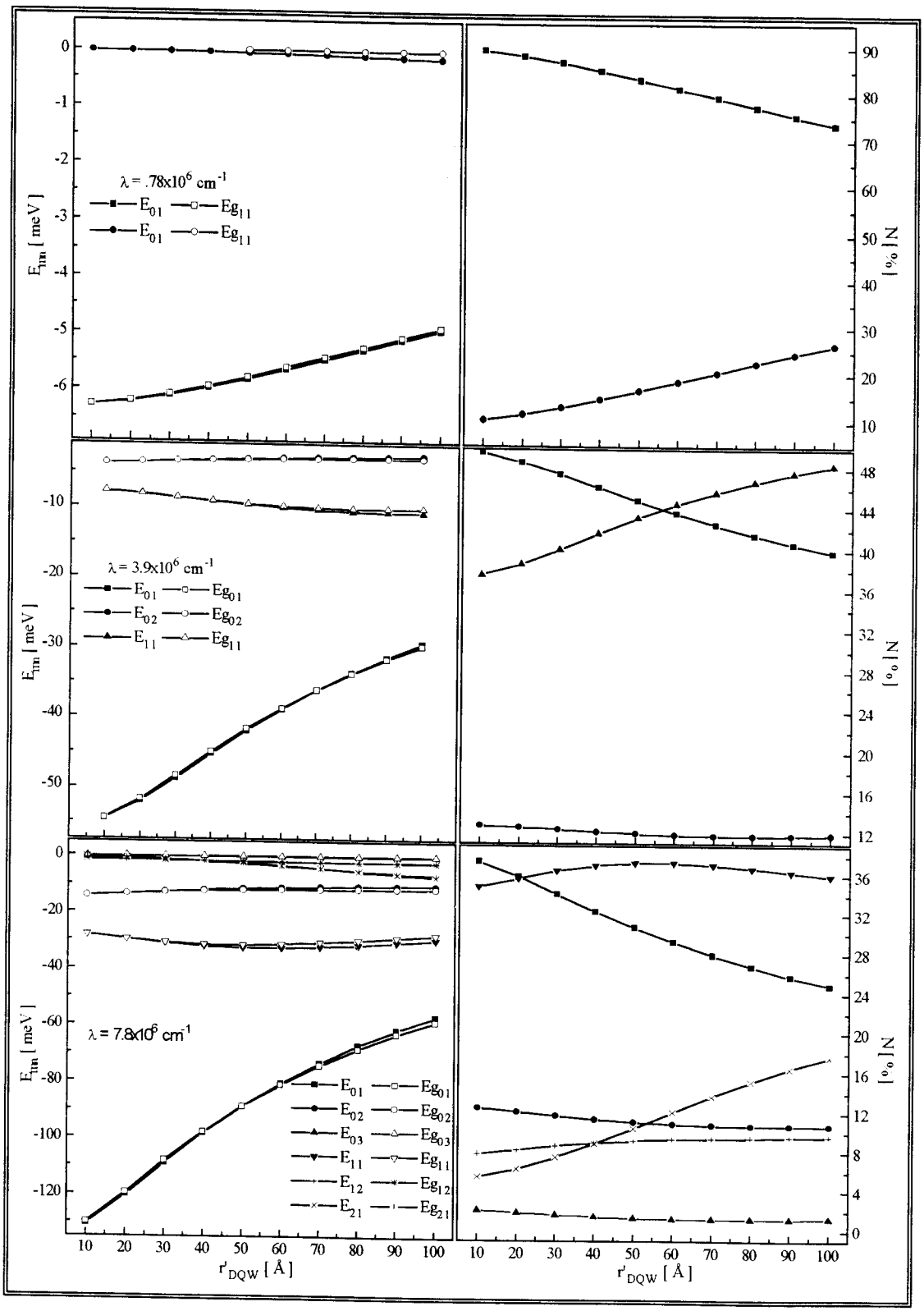

Figura 3.7. Níveis de energia, na aproximação de difusão de dopantes cilíndrica E_{mk} e gaussiana Eg_{mk}, e número relativo de elétrons em cada sub-banda, na aproximação cilíndrica, em função de r'_{DQW} com r_{DQW} = 50 Å e λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm.

Utilizando a distribuição de difusão de dopantes gaussiana para um fio $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm e r'_{DQW} entre 10 e 100 Å, a variação dos níveis de energia é apresentado na figura abaixo de modo comparativo nas aproximações de TF, Hartree e equações de LDA.

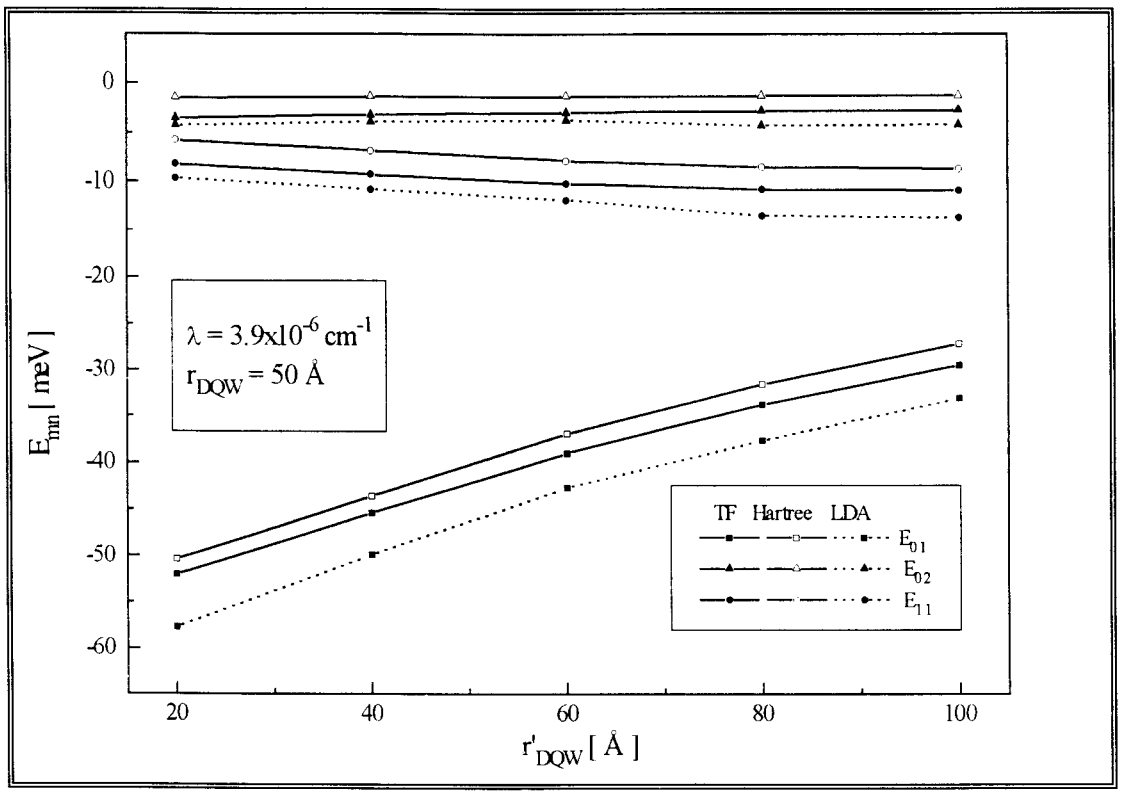

Figura 3.8. Níveis de energia calculados nas aproximações de TF-Schrödinger, Hartree e LDA para a distribuição gaussiana de dopantes em função de r'_{DQW}, com $r_{DQW} = 50$ Å e $\lambda = 3.9 \times 10^6$ doadores/cm.

3.3.3 DENSIDADE RESIDUAL DE ACEITADORES

O problema de interesse é o que envolve a incorporação, nos cálculos da estrutura eletrônica, de uma densidade residual de aceitadores uniformemente distribuída no volume do semicondutor. O sistema estudado é aquele da figura 1.2, com densidade de dopantes uniforme dado pela função (3.26). Considerando uma densidade de aceitadores residual uniforme $n_a(r) \equiv n_a$ e $\mu = 0$, o potencial efetivo na

região onde há apenas aceitadores ionizados, região II da figura 3.9, será dado pela solução da equação de Poisson:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left[r\frac{dV_{ef}(r)}{dr}\right] = -8\pi n_a \tag{3.31}$$

o que resulta em:

$$V_{ef}(r) = -4\pi n_a + A\ln(r) + B \tag{3.32}$$

onde A e B são constantes determinadas pelas seguintes condições de contorno em r_a e r_b:

$$V_{ef}(r_a) = 0, \quad \frac{dV_{ef}}{dr}(r_b) = 0 \text{ e } V_{ef}(r_b) \cong E_g \tag{3.33}$$

como indicado na figura 3.9.

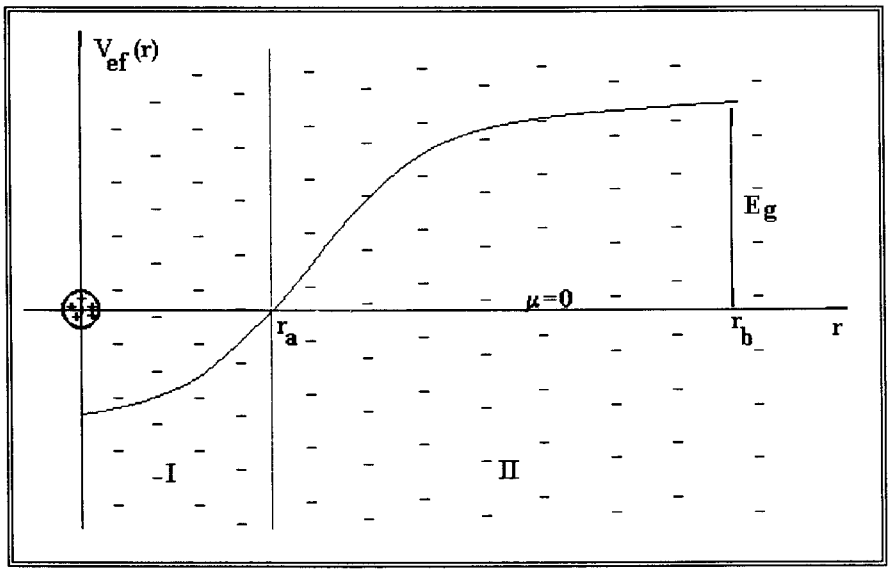

Figura 3.9. Potencial efetivo no estado fundamental do sistema (T=0K) de *fios quânticos* isolados na forma cilíndrica de $r_{DQW} = 50$ Å com incorporação de uma densidade de aceitadores uniformemente distribuída no volume do semicondutor.

Nas condições (3.33) $E_g \cong 250\ Ry\ (1520\ meV)$ é a energia do *gap* do GaAs. De (3.32) e (3.33) obtêm-se a seguinte equação que deve ser satisfeita:

$$\left(\frac{r_b}{r_a}\right)^2 = 1 + \frac{1}{4\pi n_a}\frac{dV_{ef}(r = r_a)}{dr} \tag{3.34}$$

Assim, ao encontrar o potencial efetivo na aproximação de TF através da equação (3.1), obtêm-se o lado direito da equação (3.34). Com a propagação da solução da equação (3.31) obtêm-se r_b tal que:

$$\frac{E_g}{4\pi n_a r_a^2} \cong \left(\frac{r_b}{r_a}\right)^2 \left[\ln\left(\frac{r_b}{r_a}\right)^2 - 1\right] + 1 \tag{3.35}$$

Entretanto, para uma densidade típica de 10^{15} aceitadores/cm^3, as equações (3.34) e (3.35) não admitem solução simultânea para fios com r_{DQW} = 50 Å e λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm, indicando que todos os elétrons do sistema foram depletados. Para que este sistema tenha solução seria necessário ter-se uma densidade de aceitadores menor que 10^5 aceitadores/cm^3, o que é impossível de ser obtido experimentalmente, uma vez que se trata de dopagem não intencional.

Para estimar o tamanho da camada de depleção deve-se pensar não em um fio isolado, mas em uma super-rede de fios a distâncias em que não haja substancial tunelamento entre eles. Esta distância é estimada da ordem de 200 a 300 Å como pode ser verificado no caso do fio ideal no item 3.1.1, onde a densidade eletrônica é praticamente desprezível a uma distância de 200 Å (figura 3.4). Na escala da camada de depleção, o espaçamento entre os fios pode ser considerado desprezível e tudo se passa como se a super-rede de fios, figura 3.10, fosse uma estrutura do tipo δ-dopada planar, como a estudada por Ioriatti em 1990 [3] e Barbosa em 1992 [4,5]. Se a esta for associada uma quantidade N_d de doadores por unidade de área a estimativa do número de elétrons depletados por fio [5], em função da distância **d** entre os fios, será dada por:

$$N^{dep} = \sqrt{\frac{E_g\, n_a\, d^2}{\pi}} \tag{3.36}$$

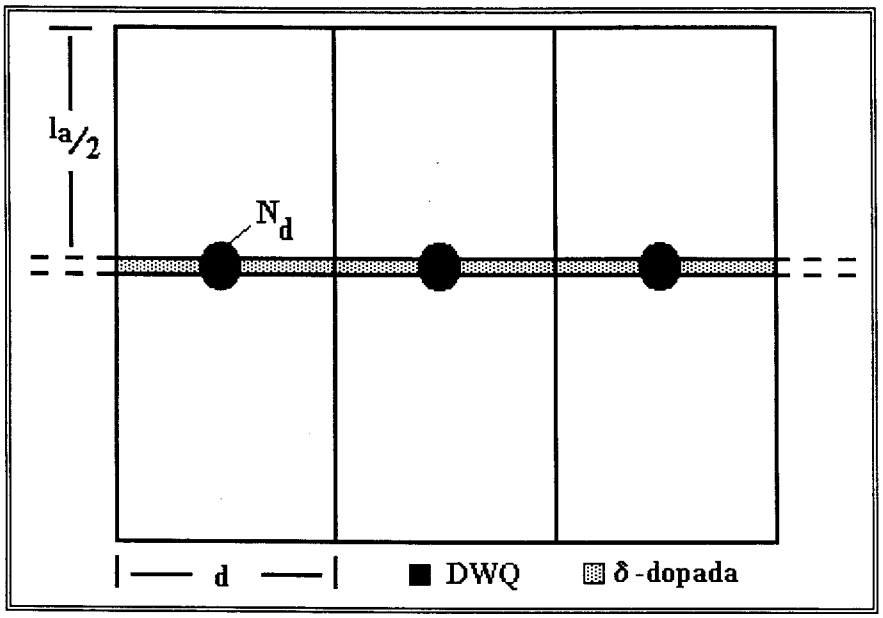

Figura 3.10. Representação idealizada de uma super-rede de *fios quânticos* isolados, que na escala da camada de depleção podem ser considerados uma estrutura do tipo tipo δ-dopada planar $d << l_a$.

Deste modo, pela lei de Gauss, a condição de contorno para a solução da equação (3.1) é dada em $r = r_a$, região I na figura 3.9, tal que:

$$V_{ef}(r_a) = 0 \text{ e } \frac{dV_{ef}}{dr}(r_a) = \frac{4}{r_a} N^{dep} \tag{3.37}$$

e o tamanho da camada de depleção:

$$l_a \cong \sqrt{\frac{E_g}{\pi n_a}} \tag{3.38}$$

Considerando então, uma densidade de 10^{15} aceitadores/cm^3 , r_{DQW} = 50 Å , λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm e d = 200 Å, os resultados do cálculo de estrutura eletrônica são apresentadas respectivamente nas tabelas 3.IV a 3.VI e graficamente nas figura 3.11 a 3.13. Nas tabelas, Ne é o número de elétrons relativos em cada sub-banda e nos gráficos os níveis de energia e densidade eletrônica por sub-banda referem-se a solução da equação de Schrödinger para o potencial efetivo na aproximação de TF.

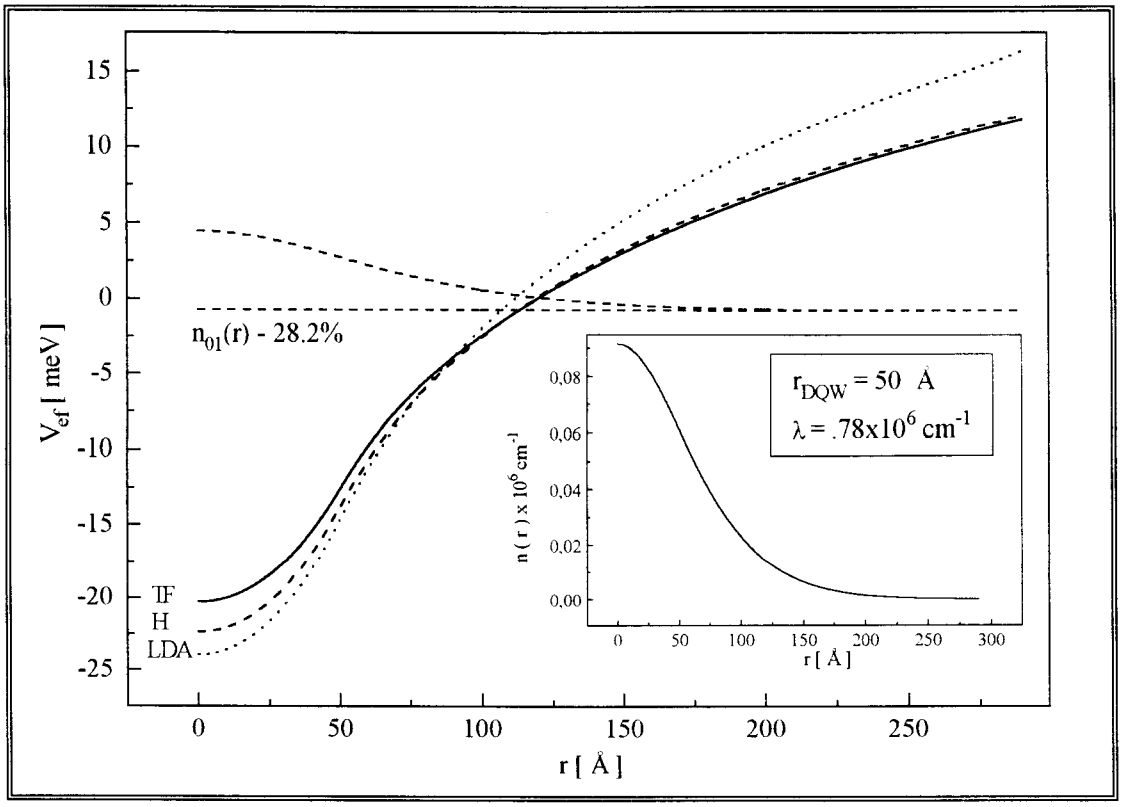

Figura 3.11. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, λ = .78 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Tabela 3.IV. Resultados da estrutura eletrônica para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, λ = .78 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m.k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		KS	
m,k	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]
0,1	- 0.7	28.2	- 0.7	28.2	- 0.7	28.2
$\langle r \rangle$ [Å]	78.7		48.0		46.7	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 20.3		- 22.4		- 24.0	

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

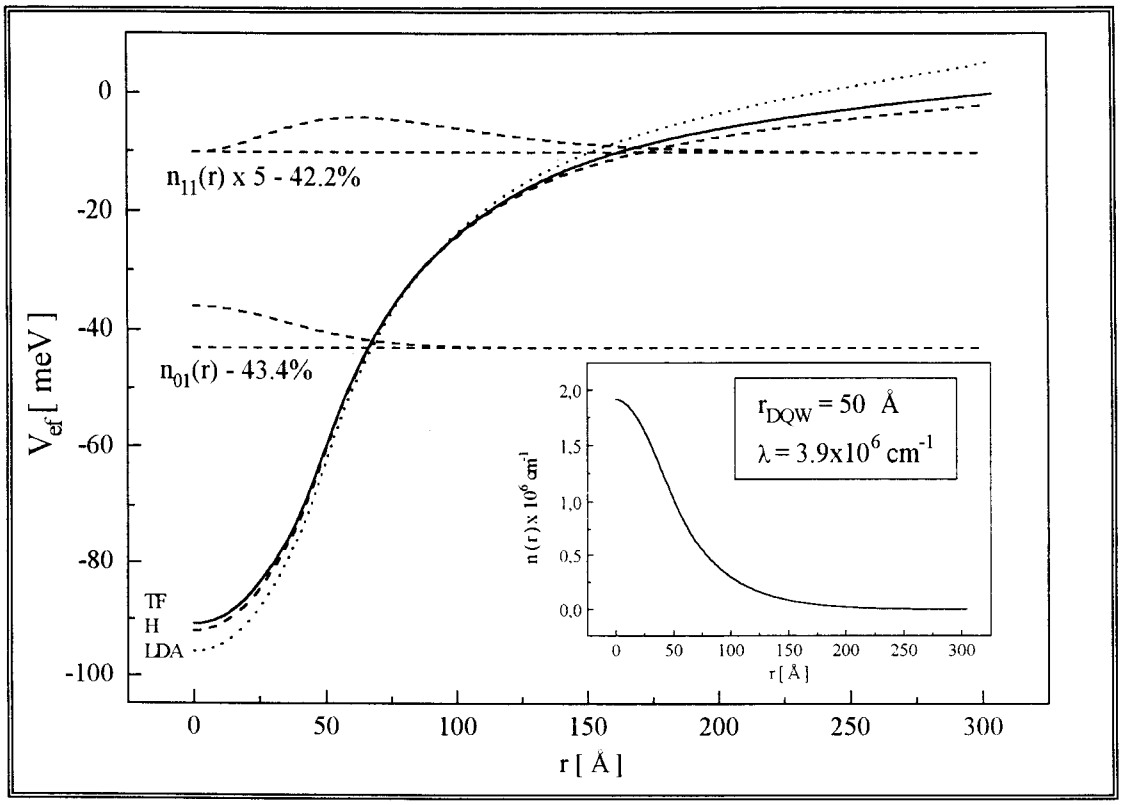

Figura 3.12. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Tabela 3.V. Resultados da estrutura eletrônica para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		KS	
m,k	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]
0,1	- 42.0	43.4	- 50.6	44.5	- 50.6	44.5
1,1	- 10.2	41.2	- 15.1	40.1	- 15.1	40.1
$\langle r \rangle$ [Å]	82.0		82.2		79.7	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 90.8		- 92.0		- 95.7	

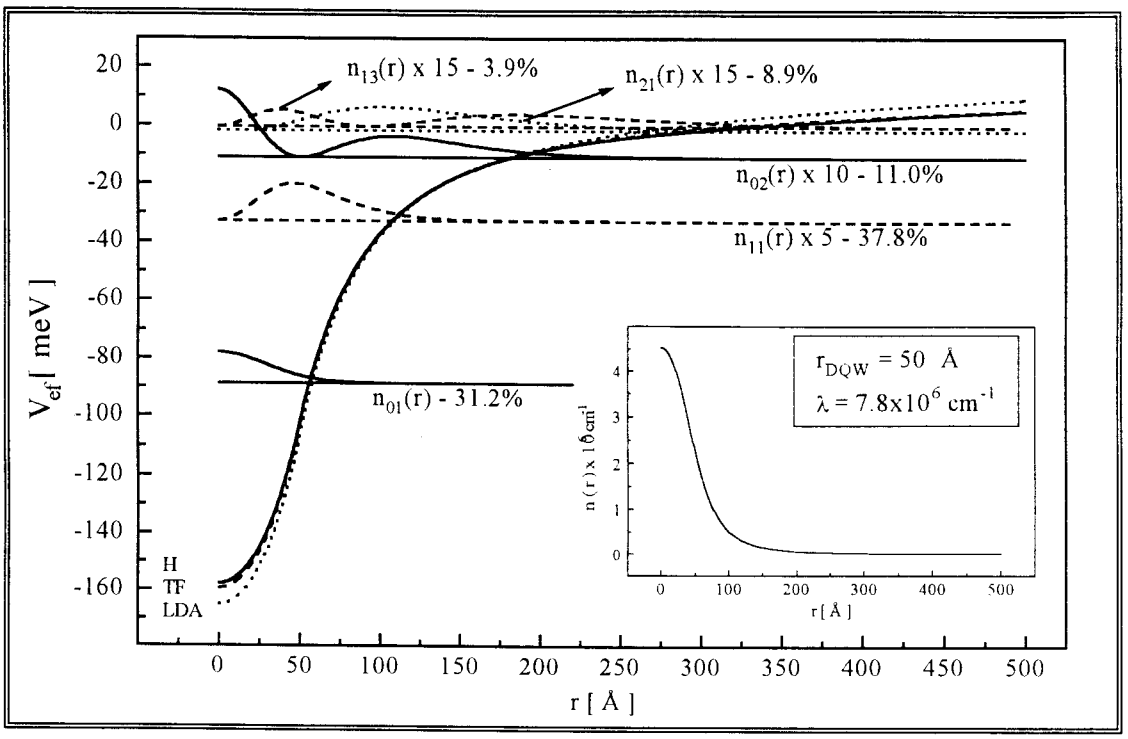

Figura 3.12. Potencial efetivo nas aproximações de TF, Hartree e LDA. Densidade eletrônica por unidade de comprimento (*inset*), níveis de energia e densidade eletrônica por unidade de comprimento por sub-banda na aproximação de TF-Schrödinger para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = 7.8 \times 10^6$ doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å.

Tabela 3.VI. Resultados da estrutura eletrônica para fios de $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = 7.8 \times 10^6$ doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm^3 e d = 200 Å, onde $E_{m,k}$ são os níveis de energia, Ne o número de elétrons relativos em cada sub-banda, $\langle r \rangle$ o raio médio da distribuição eletrônica e $V_{ef}(0)$ o fundo do potencial, referentes ao nível de Fermi $\mu = 0$.

	Thomas - Fermi		Hartree		KS	
m,k	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]	E_{mk} [meV]	Ne [%]
0,1	- 88.8	31.2	- 87.8	31.4	- 103.7	32.2
0,2	- 11.0	11.0	- 11.2	11.1	- 21.2	11.4
1,1	- 32.6	37.8	- 33.3	38.2	- 45.0	39.6
1,2	- 0.4	3.9	- 0.2	3.1	---	---
2,1	- 1.8	8.9	- 1.9	9.0	- 11.4	9.6
$\langle r \rangle$ [Å]	88.9		87.8		84.0	
$V_{ef}(0)$ [meV]	- 157.9		- 159.5		- 165.2	

3.4 ESTRUTURA ELETRÔNICA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA

O cálculo da estrutura eletrônica em função da temperatura foi realizado utilizando a aproximação de TF para *fios quânticos* isolados como o da figura 1.2, com densidade residual de doadores nula $n_a(r) = 0$ e dopantes descritos por uma distribuição retilínea unidimensional de raio r_{DQW} como o da expressão (3.26). Resolvendo a equação (3.1) sujeita as condições iniciais (3.7) e de contorno (3.8) com o potencial químico $\mu = 0$ para fios de raio $r_{DQW} = 50$ Å e $\lambda = 7.8 \times 10^6$ doadores/cm, o potencial efetivo em função da temperatura é indicado na figura 3.14.

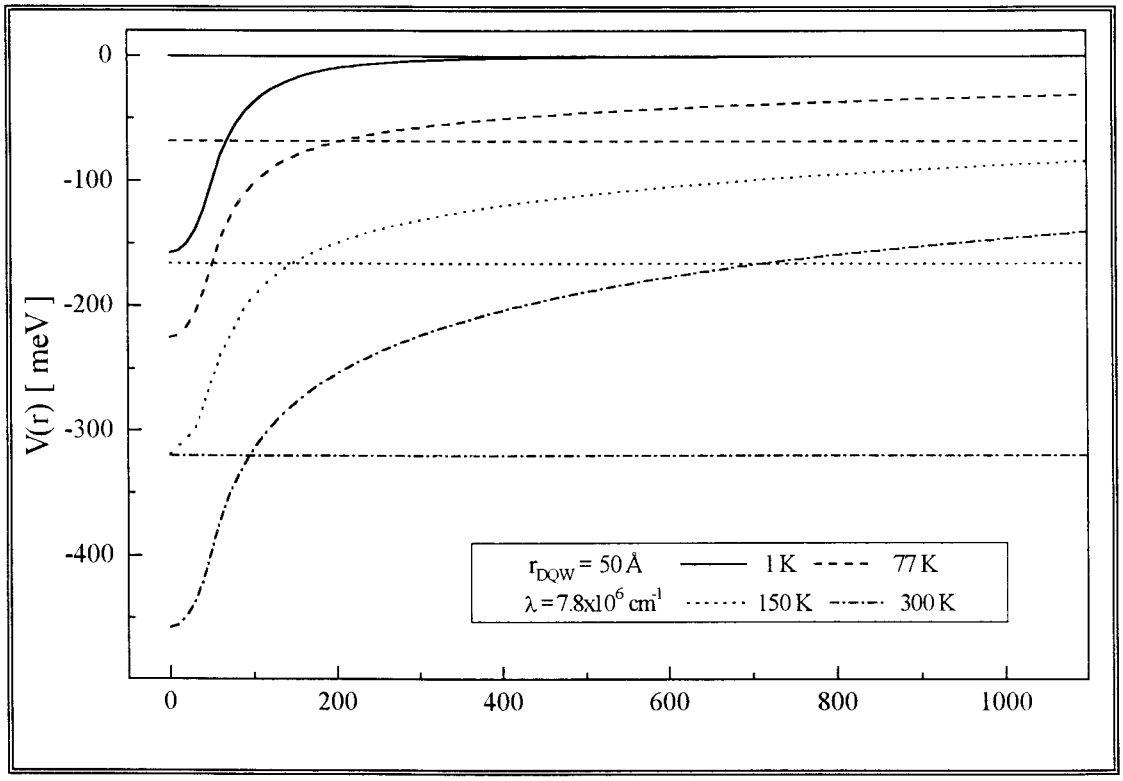

Figura 3.14. Potencial efetivo em função da temperatura na aproximação de TF para um fio de $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = 7.8 \times 10^6$ doadores/cm e $V_{ef}(T, r_o) = 0$.

Para que se tenha uma idéia quantitativa do efeito da temperatura nestes sistemas, foi calculado o raio médio $\langle r \rangle$ da distribuição eletrônica em função da temperatura da densidade linear de doadores λ e de alguns valores de r_{DQW}. Os

resultados estão apresentados na figura 3.15. O ajuste polinomial das curvas apresentou uma forma quadrática com a temperatura:

$$\langle r \rangle \propto T^2 \tag{3.39}$$

o que não pode ser previsto por primeiros princípios e até o presente momento não é conhecida a razão física para que seja esta a dependência.

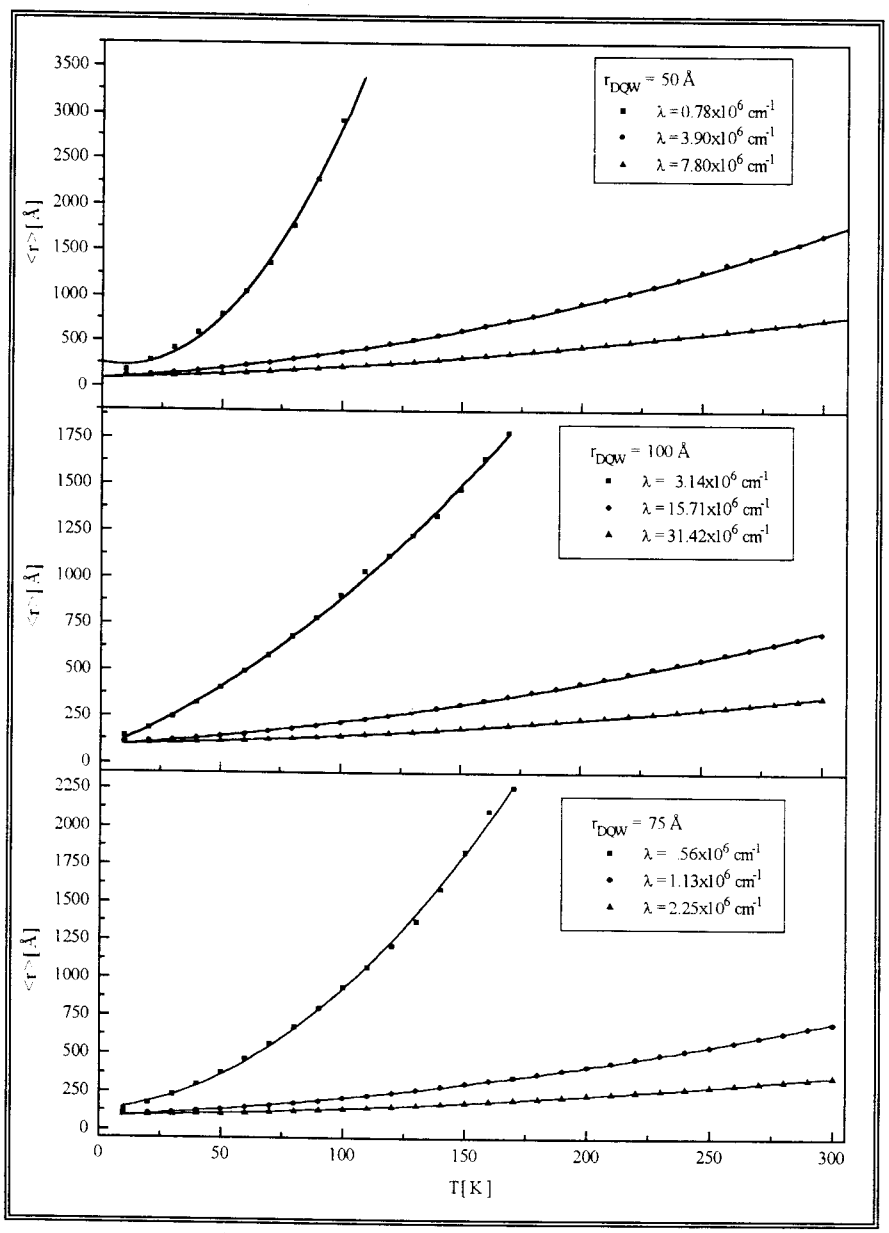

Figura 3.14. Raio médio $\langle r \rangle$ da distribuição eletrônica em função da temperatura, do raio dos fios r_{DQW} e de λ. Todas as curvas foram ajustadas com uma relação polinomial quadrática tal que $\langle r \rangle \propto T^2$.

USP -- SERVIÇO DE BIBLIOTECA

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES.

Neste trabalho apresentamos uma investigação teórica sistemática da estrutura eletrônica de *fios quânticos*, prospostos experimentalmente combinando-se as técnicas de crescimento de eptaxial em planos vicinais (terraços) e de dopagem planar abrupta. Esta investigação foi realizada na situação em particular onde estes fios podem ser considerados isolados, i. é; onde os efeitos de tunelamento não sejam significativos.

O modelo teórico proposto neste trabalho, para os cálculos da estrutura eletrônica, baseia-se em:

a) distribuição de dopantes com simetria radial;

b) fios infinitos em seu comprimento desprezando os efeitos de borda;

c) aproximação de massa efetiva e de banda parabólica;

d) incorporação de dopantes (Si) não altera a estrutura de rede cristalina (GaAs);

As aproximações de fio infinito e densidade de doadores com simetria radial faz com que a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ e o potencial $V_{ef}(\vec{r})$ que a gera dependam apenas da coordenada radial r, o que reduz os cálculos a um problema unidimensional trazendo a vantagem de ser implementado a um baixo custo computacional. Com este modelo de fios foi possível introduzir efeitos como a influência da largura e concentração da distribuição de dopantes, densidade volumétrica uniforme de aceitadores, formação de super-redes e temperatura finita que tornam estes sistemas mais próximos dos propostos experimentalmente.

Os cálculos da estrutura eletrônica destes sistemas foram realizados na aproximação semiclássica de Thomas-Fermi, conforme resultados teóricos anteriores que sugerem que esta aproximação é capaz de reproduzir quantitativamente o potencial auto-consistente deste tipo de sistema eletrônico. A menos do efeito da

temperatura, também foram utilizadas as equações de Kohn-Sham (ou aproximação LDA) com o propósito de se avaliar a possível influência de efeitos de troca e correlação eletrônica, ignoradas na abordagem semiclássica.

Para o estado fundamental do sistema (T=0K), a situação mais simples estudada foi a de fios na forma de um cilindro com: raio de $r_{DQW} = 50$ Å, densidade linear de doadores de λ=.78x10^6, 3.9x10^6 e 7.8x10^6 doadores/cm e densidade residual de aceitadores nula $n_a(r) = 0$. Os resultados para estes parâmetros estão listados nas tabelas de 3.I a 3.III e figuras de 3.3 a 3.5. As diferenças percentuais, para as principais sub-bandas, entre as aproximação de TF, Hartree e LDA foram:

Tabela 4.I. Diferenças percentuais nos níveis de energia para as principais sub-bandas eletrônicas, entre as aproximação de TF-Schrödinger, Hartree e LDA para fios com: λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$.

doadores/cm	.78 x 10^6	3.9 x 10^6	7.8 x 10^6
TF/Hartree	6%	4%	1%
TF/LDA	45%	10%	8%

Os dados desta tabela demonstram que para densidades lineares maiores que 10^6 doadores/cm (regime metálico) a aproximação de TF e equação de Schrödinger fornecem resultados compatíveis com os obtidos na aproximação de Hartree. De certa forma, este resultado era esperado, pois Ioratti [3] em 1990 e Barbosa [4,5] em 1991 demonstraram este resultado para uma estrutura do tipo δ-dopada planar. Além deste resultado a aproximação de TF traz grandes vantagens relativas aos métodos auto-consistentes quanto sua implementação numérica e tempo de CPU. Para que se tenha uma idéia quantitativa, na tabela 4.II é apresentado o tempo gasto de CPU em segundos para cada aproximação, utilizando uma estação de trabalho Digital DECSTATION 3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz

Tabela 4.II. Tempo de CPU gasto em segundos para as aproximações de TF, Hartree e LDA para fios com: r_{DQW} = 50 Å, λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm e $n_a(r) = 0$, utilizando uma estação de trabalho Digital DECSTATION 3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz.

doadores/cm	.78 x 10^6	3.9 x 10^6	7.8 x 10^6
TF	19	25	26
Hartree	731	935	1167
LDA	779	1137	1371

O passo seguinte foi incorporar uma difusão de dopantes da seguinte forma: i) cilíndrica e ii) gaussiana, ambas com densidade linear de doadores constante. Os resultados obtidos na aproximação de TF são apresentados nas figuras 3.6 a 3.8, demonstrando que estas distribuições fornecem os mesmos resultados quantitativos e ainda não alteram significativamente os níveis de energia para $|m| \geq 1$. Entretanto o estado com $m = 0$ é afetado tendo variações da ordem de 10 a 50 meV, alterando de modo significativo o número relativo de elétrons nas sub-bandas como pode ser verificado na figura 3.8. Comparando ainda estes resultados com as aproximações de Hartree e LDA, utilizando a distribuição gaussiana de dopantes, verificou-se que este efeito não altera as diferenças percentuais entre estas aproximações, como verificado através da figura 3.9 para uma λ = 3.9 x 10^6 doadores/cm.

Com base nos resultados anteriores, os efeitos de densidade volumétrica uniforme de aceitadores, formação de super-redes e temperatura finita foram incorporados nos cálculos da estrutura eletrônica utilizando-se a aproximação dada pela figura 1.2.

Na incorporação de uma densidade volumétrica uniforme de aceitadores, para fios de r_{DQW} = 50 Å e λ=7.8 x 10^6 doadores/cm, os resultados mostraram que, a menos que esta densidade seja da ordem de 10^5 aceitadores/cm, todos os elétrons do fio são depletados. Este resultado é consequencia da competição de forças elétricas entre o sistema unidimensional formado pelo fio com o sistema tridimensional formado pela distribuição volumétrica de aceitadores. Entretanto, como verificado

para o caso ideal a densidade eletrônica pode ser considerada praticamente desprezível a partir de 200 Å, o que nos sugeriu a formação de super-redes de fios separados a esta distância sendo considerados ainda isolados.

Na escala da camada de depleção, muitas vezes maior que a separação entre os fios, esta super-rede é equivalente a uma estrutura do tipo δ-dopada planar, que apresenta solução para a incorporação de uma densidade de aceitadores uniforme [3,5]. Consequência da competição eletrostática dada pela estrutura bidimensional formada pela super-rede com a tridimensional formado pela distribuição volumétrica de aceitadores. Baseados neste modelo os resultados para fios com: r_{DQW} = 50 Å , λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm, d = 200 Å e $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm estão apresentados nas tabelas 3.IV a 3.V e figuras 3.12 a 3.14. Novamente, por estas tabelas e figuras mostramos que a aproximação de TF apresenta os mesmos resultados quantitativos que a aproximação de Hartree.

Deste modo, foi possível encontrar a porcentagem de elétrons depletados, tabela 4.III e o tamanho da camada de depleção, da ordem de 5 x 10^4 Å . É importante observar que a medida que **d** aumenta mais elétrons são depletados, até recairmos no caso onde tem-se fios isolados, o que implica em **d** da ordem de 400 Å. Entretanto, para distâncias menores de que 200 Å, esta aproximação deixa de ser válida sendo necessário considerar os efeitos de tunelamento entre fios.

Tabela 4.III. Porcentagem de elétrons depletados para fios com: r_{DQW} = 50 Å , λ = .78 x 10^6, 3.9 x 10^6 e 7.8 x 10^6 doadores/cm, $n_a = 10^{15}$ aceitadores/cm e d = 200 Å.

doadores/cm	.78 x 10^6	3.9 x 10^6	7.8 x 10^6
N^{dep}(%)	72	14	7

Os efeitos da temperatura na estrutura eletrônica nestes sistemas foram incorporados apenas na aproximação de TF. Pela razão de que ao introduzir-se este efeito, níveis de energia acima do nível de Fermi, mais deslocalizados, são populados e então o potencial efetivo passa a estender-se a distâncias cada vez maiores,

USC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

tornando-o desta forma mais suave de modo a satisfazer ainda mais as condições de validade desta aproximação. Os resultados deste efeito no potencial está apresentado na figura 3.15 para fios com $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = 7.8 \times 10^6$ doadores/cm e $n_a(r) = 0$, onde $V_{ef}(T, r_o) = 0$. Surpreendentemente, o raio médio da distribuição eletrônica escala com a temperatura de forma quadrática, o que não pode ser previsto por primeiros princípios; e seus efeitos são de alargamento da distribuição eletrônica tipicamente de uma ordem de magnitude ao ir-se da temperatura de He líquido a temperatura ambiente. O tempo gasto com CPU, apesar de ser usada a aproximação de TF, aumenta consideravelmente como pode ser verificado pela tabela 4.IV. Por esta razão que não foi realizados cálculos auto-consistentes que incluiriam um número cada vez maior de estados dificultando o processamento numérico.

Tabela 4.IV. Tempo de CPU gasto em segundos para a aproximação de TF para fios com: $r_{DQW} = 50$ Å, $\lambda = .78 \times 10^6$, 3.9×10^6 e 7.8×10^6 doadores/cm $n_a(r) = 0$, utilizando uma estação de trabalho Digital DECSTATION 3000/300-LX com processador ALPHA de 125 Mhz.

doadores/cm	$.78 \times 10^6$	3.9×10^6	7.8×10^6
T(s)	24085	9672	2847

Conclusivamente podemos afirmar que, para super-redes de *fios quânticos* considerados isolados e no regime metálico (densidade de doadores maior que 10^6 doadores/cm) a aproximação de TF é capaz de reproduzir quantitativamente o potencial auto-consistente deste tipo de sistemas eletrônicos. Neste trabalho ainda demonstramos que este tipo de aproximação fornece os mesmos resultados que os da aproximação de Hartree, com precisão da ordem de 10 a 1% para densidades de 10^6 a 10^7 doadores/cm respectivamente. Pode-se notar ainda que para densidades altas os efeitos de troca e correlação não são marcantes para estes sistemas. Finalmente, a aproximação semiclássica ainda traz a vantagem de ser implementada sem grandes esforços computacionais quando comparada aos cálculos auto-consistente.

CAPÍTULO 5

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Enciclopédia Conhecer. Editor V. Civita, Vol. IV, 813-815, Abril Cultural LTDA, São Paulo, 1967.

[2] Ploog, K.; Hauser, M.; Fischer, A. Fundamental studies and device application of δ-doping in GaAs layers and in $Al_xGa_{1-x}/GaAs$ heterostructures. Appl. Phys. A **45**, 233 (1988).

[3] Ioriatti, L. Thomas-Fermi theory of δ-doped semiconductor structures: exact analytical results in the high-density limit. Phys. Rev. B **41**, No. 12, 8340 (1990).

[4] Egues, J. C. et al. Electronic transport in periodically δ-doped GaAs layers. J. Appl. Phys **70**, 3678 (1991).

[5] Barbosa, J. C. Aproximação de Thomas-Fermi aplicada a estruturas semicondutoras delta-dopadas. São Carlos, 1992 85p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo.

[6] Schubert, E. F. Delta doping of III-V compound semiconductors: fundamentals and device applications. J. Vac. Sci. and Technol. A **8**, 2980 (1990).

[7] Ramsteiner, M. et al. Raman spectroscopic study on the wirelike incorporation of Si dopant atoms on GaAs(001) vicinal surfaces. Appl. Phys. Lett. **64**, No. 4, 490 (1994).

[8] Däweritz, L.; Hagenstein, K.; Schützendübe, P. Si incorporation during molecular beam epitaxy growth of GaAs and preferential attachment of Si atoms at misorientation steps. J. Vac. Sci. and Technol. A **11**, No. 4, 1802 (1993).

[9] Wood, C. E. C. Dopant-surface migration and interactions from reflection high-energy electron diffraction dynamics. J. Appl. Phys **71**, No. 4, 1760 (1992).

[10] Bauer, G. E. W.; van Gorkum, A. A. Electronic properties of doping quantum wires. Science and Engineering of One and Zero-Dimensional Semiconductors, edited by S. P. Beaumont and C. M. S. Torres, NATO ASI series; Series B: Physiscs **214**, 133(1989).

[11] Lundqvist, S.; March, N. H. Theory of Inhomogeneous Electron Gas. Plenum Press, New York (1983).

[12] Kohn, W. Density functional theory: basic results and some observations. Density Functional Methods in Physics. Edited by R. M. Dreizler and J. da Providência, NATO ASI series; Series B: Physiscs **123**, 1 (1985).

[13] Oliveira, L. N. Eletronic structure of atoms, molecules and solids. Edited by S. Canuto, J. D'Albuquerque and F. J. Paixão; Wolrd Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 30 (1990).

[14] Kohn, W.; Hohenberg, P. Inhomogeneous electron gas. Phys. Rev. B **136**, No. 3, 865 (1964).

[15] Kohn, W.; Sham, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Phys. Rev. A **140**, No. 4, 1133 (1965).

[16] Cody, W. J.; Thacher Jr., H. C. Rational Chebyshev Approximations for Fermi-Dirac Integrals of Orders -1/2, ½ and 3/2. Math. Comput. **21**, 30 (1967).

[17] Hedin, L.; Lundqvist, B. I. Explicit local exchange-correlation potentials. J. Phys. C: Solid St. Phys. **4**, 2064 (1971).

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA