



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA
ESPACIALMENTE VARIÁVEL INDUZIDOS POR
DEFEITOS TOPOLÓGICOS**

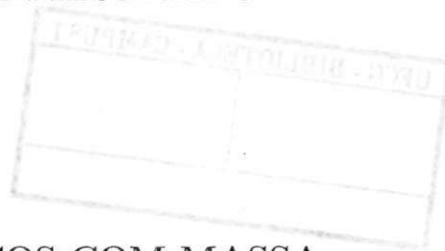
Mayara de Lima Freitas

CAMPINA GRANDE

- 2014 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO



SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA
ESPACIALMENTE VARIÁVEL INDUZIDOS POR
DEFEITOS TOPOLÓGICOS

Mayara de Lima Freitas

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Cleverson Filgueiras, apresentada à Unidade Acadêmica de Física em complementação aos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

CAMPINA GRANDE

- 2014 -



F866s Freitas, Mayara de Lima.
Sistemas quânticos com massa espacialmente variável induzidos por defeitos topológicos / Mayara de Lima Freitas. - Campina Grande, 2014.
49 f.

Dissertação (Mestrado em Ciências) - Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2014.
"Orientação : Prof. Dr. Cleverson Filgueiras".
Referências.

1. Semicondutores - Física. 2. Junções PN's. 3. Defeitos Geométricos. 4. Coeficientes - Reflexão e Transmissão. 5. Dissertação - Ciências. I. Filgueiras, Cleverson. II. Universidade Federal da Paraíba - Campina Grande (PB). III. Título

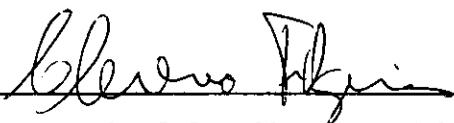
CDU 537.311.322(043)

MAYARA DE LIMA FREITAS

**Sistemas Quânticos com Massa Espacialmente Variável Induzidos por
Defeitos Topológicos**

Dissertação aprovada em 27/08/2014

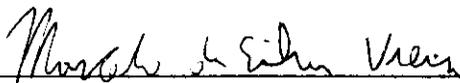
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Cleverton Filgueiras
Unidade Acadêmica de Física - UFCG
(Presidente)



Prof. Dr. Lincoln Rodrigues Ribeiro Filho
Unidade Acadêmica de Física - UFCG
(Membro interno)



Prof. Dr. Marcelo da Silva Vieira
Centro de Ciências Exatas e Sociais Aplicadas- UEPB
(Membro externo)

SISTEMAS QUÂNTICOS COM MASSA
ESPACIALMENTE VARIÁVEL INDUZIDOS
POR DEFEITOS TOPOLÓGICOS

MAYARA DE LIMA FREITAS

Aprovada em _____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras

Orientador

Prof. Dr. Marcelo Vieira

Examinador

Prof. Dr. Lincoln Rodrigues Ribeiro Filho

Examinador

*A minha mãe Maria Veralúcia Alves de
Lima, que é o meu alicerce em tudo na vida*

"O estudo em geral, a busca da verdade e da beleza são domínios em que nos é consentido ficar crianças toda a vida". (Albert Einstein)

"Existe uma coisa que uma longa existência me ensinou: toda a nossa ciência, comparada à realidade, é primitiva e inocente; e, portanto, é o que temos de mais valioso". (Albert Einstein)

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar a Deus por ter me concedido a oportunidade de existência, a saúde, a inteligência e a força de vontade para levar este trabalho a diante. Agradeço também a minha mãe que sempre foi meu ponto de apoio, meu exemplo de superação e amor, ao incentivo do meu pai, e torcida do meu irmão e familiares; Ao meu professor e orientador Cleverson Filgueiras pelo apoio, interesse em me auxiliar, toda a dedicação e pela troca de conhecimentos que o mesmo me proporcionou, assim como estou agradecida também pela colaboração do professor e coorientador, Marcelo Vieira. Aos meus amigos, pela paciência, compreensão e torcida, e dentre eles, quero agradecer especialmente a minha amiga de todas as horas Raissa Maria Pimentel Neves pelo auxílio nos estudos em toda a caminhada acadêmica e também a Desiane Maiara Gomes dos Santos pela ajuda dada, também contribuindo para esta conquista. Sou grata também a todos aqueles que torceram pela minha vitória até então, aos demais professores do Departamento de Física que contribuíram com a minha formação e por fim à CAPES pelo apoio financeiro que me prestou durante todo o período do curso.

RESUMO

A manipulação dos potenciais que agem sobre o elétron em superfícies semicondutoras a partir da criação de heteroestruturas que geram sistemas de massa variável, tem sido de fundamental importância para o desenvolvimento de nanodispositivos eletrônicos. Tais sistemas podem ser obtidos através da dopagem de materiais ou da inserção de defeitos geométricos. Neste trabalho analisamos os efeitos causados nos coeficientes de reflexão e transmissão que uma deslocação em parafuso acarreta em nanoestruturas cilíndricas semicondutoras. Concentramos nosso estudo nos casos em que as mesmas assemelham-se a um degrau potencial e a um poço quântico, observando as similaridades de comportamento entre os defeitos e as junções Pns dopadas, e suas influências na dinâmica da partícula.

Palavras Chaves: Semicondutores, junções PNs, defeitos, reflexão e transmissão.

ABSTRACT

The manipulation of the potential acting on the electron in semiconductor surfaces from creating heterostructures that generate variable mass systems, has been of fundamental importance for the development of nanoelectronic devices. These systems can be obtained by doping materials or the inclusion of geometric defects. This study analyzes the effects of the coefficients of reflection and transmission that shifted cylindrical screw carries in nanostructures semiconductor. We concentrated our study in cases where the same resemble a step potential and quantum wells, noting the similarities between the behavior of defects and PNS doped junctions and their influence on the particle momentum.

Key Words: Semiconductors, PN junction, defects, reflection and transmission.

Sumário

1	Introdução	1
2	Semicondutores, Bandas de Energia e Junções PNs	8
2.1	Bandas de Energia	9
2.2	Massa Efetiva	12
2.3	Junções Pns	14
3	Incidência de portadores no Degrau Potencial	16
3.1	Potencial Degrau com Massa constante	17
3.1.1	Potencial Degrau (Incidência Normal: $E < V_0$)	17
3.1.2	Degrau Potencial (Incidência Oblíqua: $E < V_0$)	20
3.2	Potencial Degrau com massa variável	24
3.2.1	Potencial Degrau com massa variável(Incidência Oblíqua: $E < V_0$)	25
3.3	Barreira Potencial com massa variável	27

4	Portadores em uma geometria cilíndrica com deslocação pa- rafuso.	30
5	Incidência de portadores em um Poço de potencial	37
5.1	Poço Quântico (Caso: $E < V_0$)	38
5.2	Geometria cilíndrica com deslocação em Parafuso, aplicada ao poço quântico	42
6	Conclusao	46

Lista de Figuras

2.1	Bandas e níveis de energias	10
2.2	Junção Pn de um semiconductor	15
3.1	Degrau potencial, ($E < V_0$)	17
3.2	Vetores de onda (incidência oblíqua).	21
3.3	Coefficiente de transmissão em função energia E em unidades de $\frac{E}{V_0}$ com uma escala linear da velocidade $v' = [2(E - V_0/m)']$	27
3.4	coeficiente de transmissão T para uma barreira com uma largura tal que $a = n\hbar(m'V_0)^{-1/2}$, para diversas relações de massa em função da energia E em unidades de E/V_0 Não com uma escala linear na velocidade $v' = [2(E - V_0)/m']^{-1/2}$	29
4.1	superfície cilíndrica com deslocação em parafuso	31
4.2	semiconductor cilíndrico com deslocação em parafuso (a linha tracejada representa o defeito gerador da torção helicoidal na estrutura.)	33
4.3	Gráfico da Reflexão em função da energia ϵ devido a variação no defeito κ	36
4.4	Gráfico da Transmissão em função da energia ϵ devido a variação no defeito κ	36
5.1	Poço Potencial Quântico simples	38
5.2	semiconductor cilíndrico com deslocamento parafuso (semelhante ao poço quântico)	42
5.3	Coefficiente de Transmissão em função da energia, para portadores em um poço potencial com deslocação parafuso.	45
5.4	Coefficiente de Reflexão em função da energia, para portadores em um poço potencial com deslocação parafuso.	45

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos 50 anos tem havido uma relação estreita entre Física de Semicondutores, tecnologia e engenharia de dispositivos eletrônicos, que exemplifica as dimensões do empreendimento científico a partir da mais pura Física [1]. O desenvolvimento da ciência de semicondutores foi muito mais um esforço de organização coletiva, do que individual. Ao contrário da Mecânica quântica, onde haviam muitas figuras dominantes como Niels Bohr, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, Wolfgang entre outros, a ciência dos semicondutores foi desenvolvida por cientistas trabalhando em conjunto em laboratórios de empresas como: Bell Telephone Laboratories, General Electric, RCA e outras. O seu desenvolvimento tecnológico baseou-se durante a segunda guerra mundial em detectores de microondas para uso de radares, que usavam Silício e Germânio. Um pouco antes do final da Guerra a Bell

laboratórios lançou um documento chamando "seus cientistas" incentivando a dedicação ao desenvolvimento de componentes completamente novos para sistemas de comunicação. A invenção do transistor ocorreu dois ou três anos mais tarde por J. Bardeen em 1947, sua primeira aplicação foi em um aparelho de surdez [2]. Contudo, a esse tempo, o dispositivo ainda apresentava dificuldades no que diz respeito a sua reprodução e compreensão devido à natureza de seus contatos, resultando portanto, na sua não importância industrial. No entanto sua invenção, foi a fagulha que iniciou a explosão da tecnologia de produção de melhores cristais e do estudo de materiais semicondutores. No final dos anos 50, o transistor Bipolar de Bardeen iniciou o que hoje é a multimilionária indústria eletrônica e de computadores. Os laboratórios de indústrias, de universidades e do governo americano tinham se desenvolvido na fabricação de semicondutores elementares de Silício (Si) e Germânio (Ge), e também de diversos compostos na forma de cristais de alta pureza com a maioria das propriedades já conhecidas. Com isso, as teorias para descrever a estrutura de banda começaram a aparecer na literatura e houve o desenvolvimento de várias técnicas de proteção e encapsulamento de transistores para uso comercial e militar. Desta forma, no começo dos anos 60, toda a tecnologia básica que levou aos circuitos eletrônicos altamente complexos e integrados dos dias de hoje já era conhecida.

Atualmente, o estudo do comportamento dos sistemas eletrônicos que apresentam defeitos topológicos está concentrado dentro da teoria dos de-

feitos geométricos e o estudo de sistemas quânticos no espaço com diversas topologias tem sido abordado em diferentes áreas da física como, por exemplo, a gravitação e a física da matéria condensada. No contexto da matéria condensada, a mudança na topologia em um meio material introduzida por um defeito na estrutura do sistema, desempenha um papel importante na determinação das propriedades físicas, químicas e estruturais do mesmo. Tais defeitos são classificados quanto a sua dimensão, sendo esses pontuais, lineares ou superficiais. A influência destes nas quantidades físicas de um elétron pode ser compreendida através da abordagem geométrica, onde as condições de contorno impostas pelo defeito serão incorporadas matematicamente como uma métrica numa geometria efetiva. A Geometria Diferencial tem um lugar importante na compreensão da natureza e tem contribuído com os avanços tecnológicos ao longo dos anos. Esta abordagem geométrica está baseada na correspondência, do ponto de vista matemático, que existe entre a teoria de defeitos em sólidos e a teoria da gravitação [3] [4]. Muitos sólidos têm uma estrutura cristalina e a maioria das suas propriedades físicas, tais como a plasticidade, ponto de fusão, o crescimento, etc, são definidas por defeitos da estrutura cristalina. Portanto, o estudo científico destes defeitos é significativo para aplicações. Uma ampla investigação experimental e teórica desses defeitos em cristais começou na década de trinta do século passado e está sendo continuada hoje em dia. Uma abordagem mais promissora para a teoria de defeitos é baseada na geometria de Riemann-Cartan que é de-

terminada pela métrica não trivial e de torção. Nesta abordagem um cristal é considerado como um conjunto de meios elásticos contínuos que formam uma estrutura de rotação bidimensionais, passíveis de determinação da auto-energia das cargas que se encontram na presença de distribuições contínuas de disclinações ou deslocamentos, as quais fornecem o espalhamento quântico de um elétron devido a defeitos topológicos com: dispersão, efeitos da torção sobre campos electromagnéticos, fase quântica Berry, fases geométricas em cones de grafite e etc [5].

A partir destas novas geometrias, recentes avanços na manipulação de nanoestruturas têm permitido a fabricação de sistemas quânticos com dimensões cada vez mais reduzidas. Do ponto de vista teórico, as características particulares exibidas por estes sistemas quânticos confinados são interessantes, devido a peculiaridades surgidas a partir das interações entre a geometria e a física quântica, pois, na verdade, quando o elétron é fortemente confinado em uma dessas superfícies suavemente curvas, ele experimenta uma energia potencial efetiva cuja magnitude depende destas curvaturas locais que o mesmo atravessa. É devido a este efeito, os portadores não podem movimentar-se livremente, mesmo na ausência de impurezas. Isto implica que o transporte quântico em nanoestruturas de baixa dimensão pode ser controlado por alterações das curvaturas geométricas locais [6]. A compreensão das propriedades básicas destes fenômenos quânticos é de vital importância para a construção de nanodispositivos eletrônicos com superfícies quase bidi-

mensionais onde a curvatura e os efeitos quânticos desempenham um papel importante. Alguns exemplos destes dispositivos incluem tiras únicas de cristal $NbSe_3$ Möbius, $CdSeZnS$ esféricas core-shell, pontos quânticos, Si nanofio, transistores nanofita, guias de onda quântica etc [7]. Várias publicações têm tratado o controle de partículas da mecânica quântica a uma superfície bidimensional (com aplicações em problemas de equação de Schrödinger por exemplo, ou em problemas relativistas da equação de Dirac), já para sistemas bidimensionais temos a priori uma idealização razoável para quantizar limitando a partícula em um nanotubo. A teoria dos defeitos em superfícies semicondutoras nos permite a possibilidade da criação de estruturas semelhantes a sistemas de massa variável como: barreiras de potencial, poço quântico, entre outros, os quais acarretam efeitos na dinâmica da partícula, podendo servir para a fabricação de dispositivos eletrônicos, baseados na manipulação quântica de portadores de cargas confinados em nanotubos. Um dos tipos de defeitos em superfícies, é o chamado deslocamento em parafuso, que têm influências eletrônica e óptica, profundas nas estruturas, por desempenhar papel semelhante ao de um tubo isolado do fluxo magnético, com equação de Schrödinger dotada de um potencial vetor eficaz que pode causar efeitos Aharonov-Bohm (que afirma que em certas circunstâncias, os elétrons são capazes de "sentir" a presença de um campo magnético próximo, ainda que estejam transitando em regiões do espaço onde a atividade energética é zero.), rotação de polarização da luz, atribuídos ao campo de calibre induzido

no deslocamento, entre outros [8][9][10].

Apesar da pouca quantidade de trabalhos disponíveis à respeito dos efeitos que este deslocamento, acarreta no transporte quântico, neste trabalho, objetivou-se mostrar alguns resultados da inserção deste tipo de defeito topológico em nanoestruturas cilíndricas, afim de analisar se os comportamentos nos coeficientes de reflexão e transmissão da partícula, foram condizentes com os normalmente observados em diversos casos: degrau potencial, poço quântico e etc. Nossa Abordagem é iniciada no capítulo 2 com algumas explicações e definições a cerca de estruturas semicondutoras, da formação das bandas de energia e das características adquiridas pela partícula, decorrentes das influências que a mesma recebe ao passar de um meio para outro, como é o caso da variação de sua massa efetiva. No capítulo seguinte 3 fazemos um resgate do problema quântico da barreira potencial com $E > V$ para o caso de incidência normal e oblíqua de portadores, considerando a variação sofrida na massa efetiva da partícula, e sua influência nos coeficientes de reflexão e transmissão da mesma, comparando os resultados obtidos nos gráficos com os já observados e esperados para o caso em que a massa se mantém constante. No capítulo subsequente 4, realizamos um estudo a cerca da geração de situações com massa variável, que geram regiões semelhantes a junções PN, a partir do acréscimo de defeitos de torção em forma de parafuso, em estruturas cilíndricas de nanotubos através de modificações no raio da estrutura. Afim de observar as consequências e influências da topologia sobre o

portador, seguindo o mesmo procedimento do capítulo anterior em termos de análises e comparações a cerca dos efeitos esperados para os coeficientes de reflexão e transmissão dos portadores. No capítulo 5 realizamos o mesmo procedimento do capítulo antecedente, só que agora para o caso de um poço quântico, calculando as influências que esta nova estrutura acarreta no portador de carga livre ao atravessa-la, verificando se houveram mudanças bruscas em seus coeficientes, afim de conseguir com isto, possíveis contribuições em aplicações futuras em nanodispositivos eletrônicos.

Capítulo 2

Semicondutores, Bandas de Energia e Junções PNs

Existem algumas propriedades básicas de elétrons movendo-se em cristais que são fundamentais para a compreensão dos mecanismos responsáveis pela corrente elétrica em um material e para sua utilização na Eletrônica. Um elétron num átomo isolado tem estados quânticos estacionários caracterizados por níveis de energia discretos e quantizados, correspondendo aos orbitais atômicos designados por 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, etc. Em um átomo contendo muitos elétrons, o estado fundamental é obtido a partir da distribuição dos vários elétrons pelos níveis de menor energia possível, obedecendo ao postulado da mecânica quântica, designado de Princípio de Exclusão de Pauli, o qual fora formulado pelo físico suíço de origem austríaca Wolfgang em 1925, que o fez obter o Prémio Nobel da Física em 1945. Segundo este princípio,

a Natureza não permite que num mesmo sistema, existam dois elétrons com a mesma energia e em estados que coincidam os quatro números quânticos: principal, secundário, magnético e de spin. A partir deste princípio, que também é válido para todas as partículas com spin semi-inteiro, como é o caso dos prótons e nêutrons, é possível deduzir a distribuição eletrônica em camadas no átomo e conseqüentemente, o sistema periódico dos elementos. Portanto, como o elétron é dotado de spin (possíveis orientações que partículas subatômicas carregadas como prótons, elétrons e alguns núcleos atômicos podem apresentar quando imersos em um campo magnético) cada estado orbital comporta dois elétrons com spins opostos. Mas como tratamos de um grande número de átomos, os estados eletrônicos modificados quando aproximamos estes átomos tornam-se um problema quântico bem mais complicado do que num átomo isolado, pois os elétrons de cada átomo são sujeitos à interação com os átomos vizinhos. O que ocorre é que ao trazermos um átomo isolado para próximo de outro, os níveis de energia de cada um são perturbados levemente pela presença do vizinho. Aproximando um grande número de átomos, teremos um grande número de níveis próximos uns dos outros, formando as chamadas bandas de energia [11].

2.1 Bandas de Energia

Levando em consideração o caso de dois átomos de hidrogênio se aproximando, percebe-se que ocorre um acoplamento entre os estados quânticos de cada

átomo, resultando numa divisão em dois novos estados. Um efeito similar acontece ao aproximarmos N átomos de qualquer elemento. Os níveis discretos dos vários átomos, agora próximos, sofrem acoplamentos, resultando em faixas ou bandas de energias de estados permitidos. Cada banda formada apresenta um número muito grande de estados permitidos. Uma banda pode estar separada da próxima banda por uma faixa de energia proibida, ou seja, mesmo sem estados permitidos possuir ainda larguras que podem variar bastante, dependendo do elemento químico constituinte do sólido, podendo inclusive ser negativo devido a sobreposição de duas bandas consecutivas (figura 2.1).

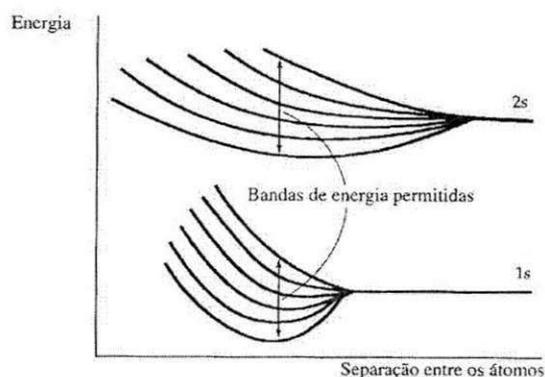


Figura 2.1: Bandas e níveis de energias

Estas bandas de energia são caracterizadas pelo fato das energias possíveis dos elétrons estarem agrupadas em bandas permitidas, separadas por bandas

proibidas no interior de um sólido. Devido à periodicidade do potencial criado por íons nos sólidos, são definidos dois tipos de bandas: *bandas de valência* que são as bandas de energia mais profundas e completamente ocupadas por elétrons, sendo inertes do ponto de vista térmico e elétrico, correspondendo aos níveis atômicos de energia mais baixa, que levemente são afetados pela presença de outros átomos no cristal; e as bandas parcialmente preenchidas, chamadas de *bandas de condução*. Num Cristal com n elétrons, o estado fundamental de energia é obtido preenchendo-se os níveis de menor energia de modo a termos somente um elétron em cada estado. Como há duas células unitárias por estado em cada banda, o número de bandas ocupadas no estado fundamental é um número inteiro ou semi-inteiro. Logo, em um cristal com temperatura de zero Kelvin, haverá várias bandas preenchidas por elétrons, sendo as propriedades de condução do cristal dependentes do fato da última banda estar cheia ou não. Com isso temos os isolantes, que são materiais que não conduzem corrente elétrica, pois são cristais que possuem a última banda completamente cheia. Neles, a aplicação de um campo elétrico externo não pode alterar o momentum total dos elétrons que é nulo, pois todos os estados estão ocupados, não havendo passagem da corrente elétrica quando o campo é aplicado. Temos também os materiais *condutores*, chamados de metais, que contém a última banda semi-cheia que ocorre sempre que o número de elétrons por célula unitária for ímpar, sendo possível a ocorrência de uma mudança nos estados dos elétrons com a aplicação de um campo elétrico,

resultando em uma corrente elétrica. E por fim, temos os *Semicondutores* que possuem uma condutividade significativa, visto que, em um Cristal isolante, somente na temperatura $T = 0K$ a última banda (que é a de valência completamente cheia, estando em temperaturas maiores que zero) propicia aos elétrons presentes um ganho de energia térmica suficiente para atingirem a banda seguinte, o que consiste na condução, resultando em estados vazios, que se comportam como portadores de carga positiva, chamados de buracos, gerando corrente elétrica durante este processo. A condutividade do material depende da quantidade de elétrons que passam para a banda de condução e esta quantidade é proporcional à temperatura e a energia de separação existente entre as duas bandas; esta energia de separação é representada por E_g , onde o índice g vem da palavra gap, que significa Hiato. Já os materiais que são isolantes a $T = 0K$ têm E_g relativamente pequeno, da ordem de 1 eV ou menos, à temperatura ambiente, o que os faz possuir uma condutividade significativa.[11].

2.2 Massa Efetiva

Quando um elétron encontra-se sob a ação de um campo elétrico, de um campo magnético ou de um potencial periódico acelerado, em relação a rede, este pode sofrer variações numericamente diferentes em sua massa inicial, acarretando alterações profundas em suas propriedades dinâmicas. Este fato, faz com que a partícula adquira um comportamento como se possuísse uma

massa efetiva, isto não implica que o cristal vá pesar menos se a massa efetiva do portador for menor do que a massa do elétron livre, nem também que a segunda lei de Newton será violada para o cristal considerado como um todo. [12, 13].

Um elétron em movimento é descrito por um pacote de onda que move-se com uma velocidade de grupo $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial \kappa}$. Sendo $E = \hbar \omega$, podemos escrever

$$\frac{\partial E}{\partial \kappa} = \hbar v_g \quad (2.2.1)$$

$$\partial E = \hbar v_g \partial \kappa \iff dE = \hbar v_g d\kappa \quad (2.2.2)$$

Caso este elétron seja submetido a uma força F de uma campo elétrico, sua energia irá variar de acordo com

$$dE = F dx \quad (2.2.3)$$

Portanto, podemos igualar (2.2.2) com (2.2.3), obtendo

$$F dx = \hbar v_g d\kappa \quad (2.2.4)$$

Como $dx = v_g dt$ vem,

$$F = \hbar \frac{d\kappa}{dt} \quad (2.2.5)$$

o que nos leva à segunda lei de Newton. Fato que nos surpreende, por talvez esperarmos um efeito mais drástico do potencial sobre o movimento

do elétron. Com isso, vemos então que a rede não afeta a forma da equação da variação do momento e sim a dependência da energia com o momento, resultando, portanto, numa mudança na massa do elétron [11].

A aceleração do elétron, expressa em função de E e κ , pode nos ajudar a mostrar essa provável dependência da energia com o momento como causadora de sua respectiva mudança na massa. sabendo que

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa \partial t} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2} \frac{d\kappa}{dt}, \quad (2.2.6)$$

substituindo o valor de $d\kappa/dt$ dado pela equação 2.2.5, obtemos

$$F = \left(\frac{\hbar^2 \partial \kappa^2}{\partial^2 E} \right) a \quad (2.2.7)$$

Como a força é dada pela segunda lei de Newton $f = ma$, vemos que sob a ação de uma força externa o elétron no cristal age semelhantemente a um elétron fora do cristal (elétron livre), porém, com uma **massa efetiva** [11]

$$m' = \frac{\hbar^2 \partial \kappa^2}{\partial^2 E} \quad (2.2.8)$$

2.3 Junções Pns

Um material semiconductor pode ser dopado com diferentes impurezas, possibilitando com isto, a fabricação de uma grande variedade de dispositivos eletrônicos. Em cada dispositivo semiconductor existe pelo menos uma junção Pn, a qual é formada por uma fina camada de transição com espessura na faixa de 10^{-2} a $1\mu m$, onde o lado p é composto por buracos e o lado n por

elétrons. A região nas proximidades desta junção é chamada de transição ou depleção e o campo criado na mesma, corresponde a uma diferença de potencial V_0 entre o lado p e o lado n, impedindo a passagem de portadores de um lado para o outro, formando uma barreira de potencial que é o fenômeno físico mais importante que ocorre na junção, por ser o principal responsável por suas características elétricas. [11].

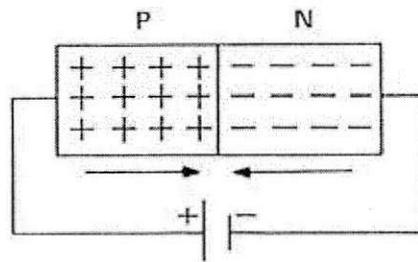


Figura 2.2: Junção Pn de um semicondutor

A introdução destas definições sobre dispositivos semicondutores, massa efetiva do elétron e junções Pns, nos conduzem à compreensão teórica à respeito de suas relações com superfícies os degraus e poços quânticos potenciais, em torno dos quais se desenvolverá nosso trabalho.

Capítulo 3

Incidência de portadores no Degrau Potencial

Neste capítulo resgatamos um sistema muito comum na M. Quântica que é o Potencial Degrau, onde portadores de cargas livres deslocam-se através de meios distintos, dinâmica esta que acarreta alguns efeitos nos coeficientes de reflexão e transmissão da partícula, dependendo da maneira em que a mesma seja incidida. Analisamos para isto os casos de incidência normal e oblíqua de um portador em uma junção PN. Considerando os casos com massa constante e variável.

3.1 Potencial Degrau com Massa constante

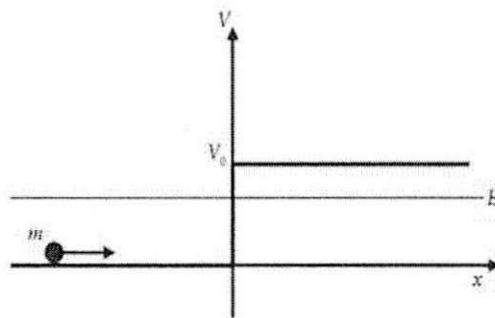


Figura 3.1: Degrau potencial, ($E < V_0$)

O potencial degrau consiste em uma região $x < 0$ na qual a energia potencial é nula, seguida de uma região $x > 0$ na qual a energia potencial é constante e de valor E_0 . Vamos inicialmente analisar a travessia da partícula através do degrau, desconsiderando as alterações que a descontinuidade no potencial causa na massa efetiva da mesma.

3.1.1 Potencial Degrau (Incidência Normal: $E < V_0$)

O estudo das propriedades ondulatórias associadas a propagação de uma partícula quântica de massa m e energia E , que se movimenta unidimensionalmente e incide sobre um potencial V , parte da resolução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi + V\psi \quad (3.1.1)$$

que possui respectivamente as seguintes características, antes (onde $V_1 = 0$) e depois ($V_2 = V_0$) do degrau :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) + V_1 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.1.2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) + V_2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.1.3)$$

cujas soluções são funções de onda $\psi(x)$ associadas à partícula.

$$\psi(x) = A^{(ikx)} + B^{(-ik'x)} \quad (3.1.4)$$

$$\psi(x) = C^{(ikx)} \quad (3.1.5)$$

onde os vetores de onda são respectivamente, antes e depois do degrau, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e $k' = \sqrt{2m(E - V_2)/\hbar^2}$. A descontinuidade do potencial em $x = 0$ exige cuidados adicionais, pois $\psi(x)$ e $\frac{d}{dx}$ devem ser finitas, contínuas e unívocas onde $\psi(x)$ é uma função bem comportada. Como o potencial $V(x)$ é finito (embora descontínuo) nesse ponto, é preciso que a segunda derivada, da equação de Schrödinger, esteja definida e seja também finita em $x = 0$. Isso só será possível, aplicando e satisfazendo as condições de descontinuidade de ψ e sua derivada. Podemos, portanto, encontrar a relação entre os coeficientes das soluções gerais, pelas relações:

$$A + B = C \quad (3.1.6)$$

$$\frac{k}{m}(A - B) = \frac{k'}{m}C \quad (3.1.7)$$

Uma vez definida a forma do potencial $V(x)$, obtemos, portanto, a solução geral para estas função de onda $\psi(x)$ e dela conseguimos identificar suas componentes associadas à incidência $\psi_I(x)$, reflexão $\psi_R(x)$ e transmissão $\psi_T(x)$ da partícula, quando sujeita a este potencial. Ao deslocarem-se, as partículas carregam com sigo, densidades de correntes de probabilidades, ou fluxos, que podem ser obtidas através da expressão geral

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \quad (3.1.8)$$

que pode ser particularizada para cada uma das componentes da função de onda em questão, ou seja, podemos ter probabilidades de reflexão $R(E)$ e transmissão $T(E)$ da partícula, quando sujeita ao potencial $V(x)$. As mesmas são definidas pelas razões entre os fluxos refletido e transmitido e o fluxo incidente, que nos permitem calcular os coeficientes de reflexão e transmissão da partícula.

$$R(E) \equiv \left| \frac{J_R}{J_I} \right| \quad (3.1.9)$$

$$T(E) \equiv \left| \frac{J_T}{J_I} \right| \quad (3.1.10)$$

sendo $V(x)$ um potencial real, então reflexão e transmissão são as únicas possibilidades que a partícula encontra ao ser incidida, de modo que devemos ter

$$R(E) + T(E) = 1 \quad (3.1.11)$$

Em outras palavras, ao atingir $V(x)$, o fluxo de probabilidade incidente se desdobra em um fluxo refletido e outro transmitido e, portanto, a Eq.3.1.11 traduz a conservação do fluxo de probabilidade. Nos problemas de espalhamento unidimensionais, as partículas no feixe incidente estão associadas a estados estacionários, em que o momento linear tem um valor bem definido. Nestas circunstâncias percebe-se que a densidade de probabilidade é independente do tempo e que a corrente de probabilidade deve permanecer contínua também nos pontos de descontinuidade do potencial. [14].

3.1.2 Degrau Potencial (Incidência Oblíqua: $E < V_0$)

As leis de Snell descrevem o comportamento de ondas eletromagnéticas se propagando através de meios com diferentes índices de refração. A reflexão e a refração da luz são fenômenos ondulatórios sujeitos as condições de contorno existentes na interface de separação das superfícies. Na Mecânica Quântica podemos fazer uma analogia destes fenômenos com os efeitos que a uma onda probabilística sofre ao atravessar um degrau potencial, que funciona como um meio de separação entre meios com índices de refração distintos. Neste tópico repetiremos os cálculos da seção anterior, só que desta vez consideramos a incidência oblíqua da onda de probabilidade em uma junção de semicondutores. Assim como na Óptica, ao ser incidida a onda de probabilidade reflete e também transmite, formando ângulos com a horizontal de acordo com o tipo de incidência. Analogamente ao caso clássico, podemos obter as leis de Snell

e também o índice de refração quântico dos meios de separação da onda.

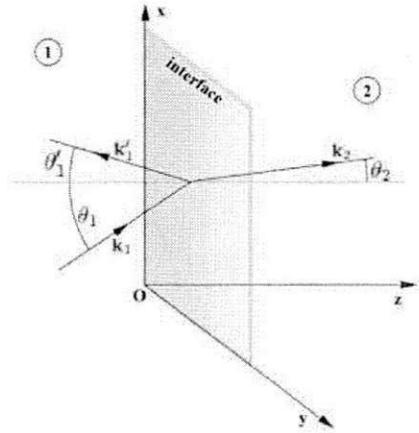


Figura 3.2: Vetores de onda (incidência oblíqua).

A segunda lei de Snell que trata da reflexão total da onda, vem da relação entre os ângulos de incidência e reflexão das partículas.

$$k_i \sin \theta_i = k_r \sin \theta_r \quad (3.1.12)$$

$$\theta_i = \theta_r \quad (3.1.13)$$

A partir da qual, encontra-se a terceira lei que trata da refração da onda

$$k_i \sin \theta_i = k_r \sin \theta_r = k_t \sin \theta_t \quad (3.1.14)$$

sendo, $\theta_i = \theta_r$, temos

$$k_i = k_r = k_t \frac{\sin \theta_t}{\sin \theta_i} \quad (3.1.15)$$

sabendo que, $k_i = k_r = k_t \frac{n_1}{n_2}$, podemos obter

$$\frac{n_1}{n_2} k_t = k_t \frac{\sin \theta_t}{\sin \theta_i} \quad (3.1.16)$$

Cujos índices de refração quânticos resultam das expressões

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} (E - V) \psi = 0 \quad (3.1.17)$$

onde, $E = \hbar \omega^2 = \hbar^2 \omega^2$, e a equação de schrödinger acima, fica

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{2m \omega^2}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 e^2 (E - V)}{E^2} \right) \psi = 0 \quad (3.1.18)$$

O índice de refração quântico é, portanto,

$$n = \sqrt{2me^2 \frac{(E - V)}{E^2}} \quad (3.1.19)$$

o qual não depende de \hbar devido ao meio ser dispersivo.

Considerando ainda a massa constante, no caso da incidência da onda probabilística ser oblíqua, ela estará sujeita a mudança de meios ao atravessar a barreira e suas funções de ondas serão semelhantes ao caso de incidência normal. Diferindo agora, pelo fato de considerarmos para este problema, as dimensões x e y, devido ao ângulo de inclinação da incidência.[15]

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V_1 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.1.20)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V_2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.1.21)$$

Nos cristais de semicondutores, as partículas carregadas estão sujeitas as mesmas condições de contorno e têm uma massa efetiva que varia quando a partícula se desloca na interface.

$$\psi(0^-) = \psi(0^+); \frac{\psi'}{m}(0^-) = \frac{\psi'}{m}(0^+) \quad (3.1.22)$$

Sendo as soluções das funções de onda, do tipo:

$$\psi(x, y) = A^{(ikx+ky)} + B^{(-ik'x+ky)} \quad (3.1.23)$$

$$\psi(x, y) = C^{(ikx+ky)} \quad (3.1.24)$$

onde os vetores de onda, antes e depois do degrau, são respectivamente $k = \sqrt{2mE}$ e $k' = \sqrt{2m(E - V_2)}$. Podemos encontrar a partir das condições de contorno, as relações

$$A + B = C \quad (3.1.25)$$

$$\frac{k}{m}(A - B) = \frac{k'}{m}C \quad (3.1.26)$$

temos, no entanto, a velocidade de grupo, dada pela relação entre os vetores de onda com as massas da partícula em sua travessia

$$\nu = \frac{k}{m} \quad (3.1.27)$$

$$\nu' = \frac{k'}{m} \quad (3.1.28)$$

portanto, as relações para os coeficientes de reflexão e transmissão da partícula, ficam:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{\nu - \nu'}{\nu + \nu'} \right)^2 \quad (3.1.29)$$

$$T = \frac{\nu' |C|^2}{\nu |A|^2} = \frac{4\nu\nu'}{(\nu + \nu')^2} \quad (3.1.30)$$

o que nos levou aos resultados,

$$R = \frac{\left(\sqrt{2E/m} - \sqrt{2(E - V_2/m)} \right)^2}{\left(\sqrt{2E/m} + \sqrt{2(E - V_2/m)} \right)^2} \quad (3.1.31)$$

$$T = \frac{4 \left[\left(\sqrt{2E/m} \right) \left(\sqrt{2(E - V_2/m)} \right) \right]^2}{\left(\sqrt{2E/m} + \sqrt{2(E - V_2/m)} \right)^2} \quad (3.1.32)$$

3.2 Potencial Degrau com massa variável

Analisemos agora a travessia de uma onda probabilística novamente com incidência oblíqua sobre um degrau potencial, só que submetida a variação na massa efetiva, devido a descontinuidade do potencial, onde nossas expressões são escritas em duas dimensões x e y, e com o acréscimo do parâmetro m' , para representação da nova massa.

3.2.1 Potencial Degrau com massa variável (Incidência Oblíqua: $E < V_0$)

No caso que segue teremos as seguintes condições para os potenciais e massas, antes e após o degrau, ($V = 0, m = m$) e ($V > 0, m = m'$). Cujas funções de ondas são,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V_1 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.2.33)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m'} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + V_2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.2.34)$$

Nos cristais de semicondutores, as partículas carregadas estão sujeitas as mesmas condições de contorno e têm uma massa efetiva que varia quando a partícula se desloca na interface.

$$\psi(0^-) = \psi(0^+); \frac{\psi'}{m}(0^-) = \frac{\psi'}{m'}(0^+) \quad (3.2.35)$$

Sendo as soluções das funções de onda, do tipo:

$$\psi(x, y) = A^{(ikx)} + B^{(-ik'x)} \quad (3.2.36)$$

$$\psi(x, y) = C^{(ikx)} \quad (3.2.37)$$

onde os vetores de onda, antes e depois do degrau, são respectivamente $k = \sqrt{2mE}$ e $k' = \sqrt{2m'(E - V_2)}$. Podemos encontrar a partir das condições de contorno, as relações

$$A + B = C \quad (3.2.38)$$

$$\frac{k}{m}(A - B) = \frac{k'}{m'}C \quad (3.2.39)$$

temos, no entanto, a velocidade de grupo, dada pela relação entre os vetores de onda com as massas da partícula em sua travessia

$$\nu = \frac{k}{m} \quad (3.2.40)$$

$$\nu' = \frac{k'}{m'} \quad (3.2.41)$$

portanto, as relações para os coeficientes de reflexão e transmissão da partícula, ficam:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{\nu - \nu'}{\nu + \nu'} \right)^2 \quad (3.2.42)$$

$$T = \frac{\nu' |C|^2}{\nu |A|^2} = \frac{4\nu\nu'}{(\nu + \nu')^2} \quad (3.2.43)$$

o que nos levou aos resultados,

$$R = \frac{\left(\sqrt{2E/m} - \sqrt{2(E - V_2/m')} \right)^2}{\left(\sqrt{2E/m} + \sqrt{2(E - V_2/m')} \right)^2} \quad (3.2.44)$$

$$T = \frac{4 \left[\left(\sqrt{2E/m} \right) \left(\sqrt{2(E - V_2/m')} \right) \right]^2}{\left(\sqrt{2E/m} + \sqrt{2(E - V_2/m')} \right)^2} \quad (3.2.45)$$

As representações gráficas para os coeficientes acima, são dadas nos trabalhos [15], onde o coeficiente de transmissão foi plotado em função dos valores de energia.

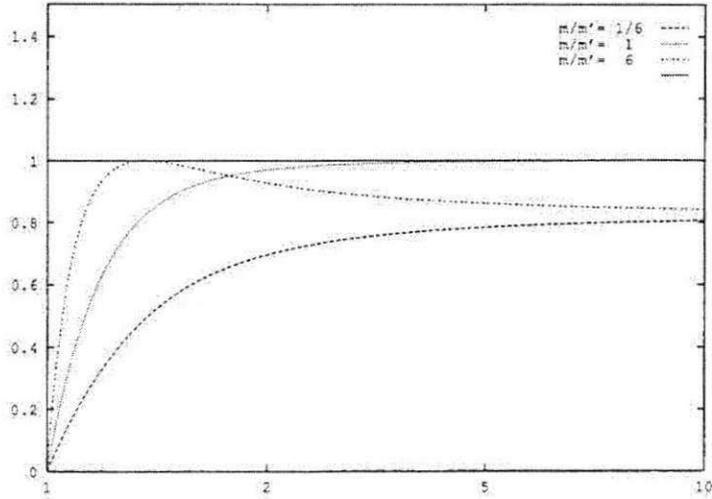


Figura 3.3: Coeficiente de transmissão em função energia E em unidades de $\frac{E}{V_0}$ com uma escala linear da velocidade $\nu' = [2(E - V_0/m)']$.

3.3 Barreira Potencial com massa variável

Consideremos agora uma simples barreira de potencial, na qual, os portadores também sofrem variação de massa ao se sujeitarem a descontinuidade de potencial oferecida pela mesma. Onde, de acordo com o trabalho [15], podemos atribuir a nova condição de contorno $M^{-1}(x) \frac{d\varphi}{dx}$, que conduz para o coeficiente de transmissão à seguinte expressão

$$T = \left[1 + \left(\frac{\nu^2 - \nu'^2}{2\nu\nu'} \right)^2 \sin^2 k'a \right]^{-1} \quad (3.3.46)$$

$$R = \left[1 + \left(\frac{2\nu\nu'}{\nu^2 - \nu'^2} \right)^2 \sin^2 k'a \right]^{-1} \quad (3.3.47)$$

Vê-se que o comportamento das velocidades de grupo ν e ν' depende crucialmente se $m = m'$ ou $m < m'$:

(i) quando $m = m'$ o coeficiente de transmissão não vai para a unidade medida que aumenta a energia. Em vez disso, ele mantém oscilante entre a unidade e um valor menor assintótico T.

(ii) quando $m < m'$, o coeficiente de transmissão atinge a unidade, mais um valor de energia além das transparências "usuais da Ramsauer-Townsend" que são obtidas quando o termo $ka = 0$. Havendo, portanto, transmissão total, que corresponde a $T=1$ [15].

Cujo gráfico obtido, segundo [15] para a variação deste coeficiente em função da atribuição de valores de energia, está representado na figura 3.3

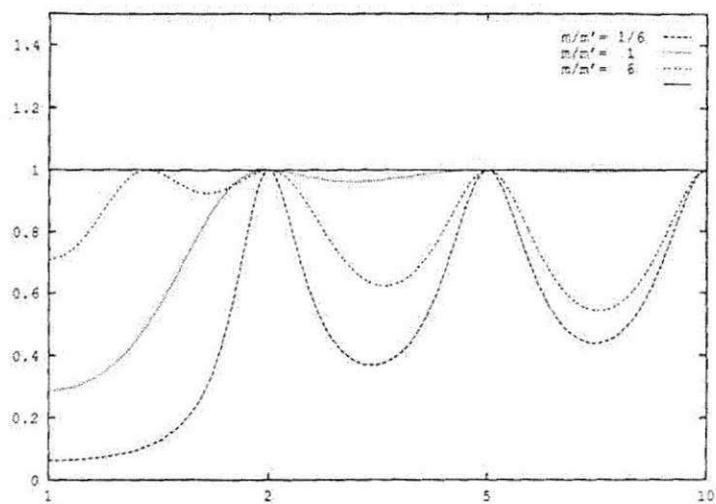


Figura 3.4: coeficiente de transmissão T para uma barreira com uma largura tal que $a = n\hbar(m'V_0)^{-1/2}$, para diversas relações de massa em função da energia E em unidades de E/V_0 . Não com uma escala linear na velocidade $v' = [2(E - V_0)/m']^{-1/2}$

Capítulo 4

Portadores em uma geometria cilíndrica com deslocação parafuso.

Quando um portador de carga atravessa uma barreira de potencial ele fica sujeito as condições de contorno existentes na mesma, devido a uma DDP (diferença de Potencial) existente entre os meios que a compõe. Algumas literaturas apontam que deformações feitas em superfícies semicondutoras, podem acarretar efeitos sobre as propriedades de transmissão da partícula, ocasionando interferência quântica induzida e comportamentos oscilatórios em função dos parâmetros geométricos [16]. Para tanto, analisamos, as implicações físicas que um semiconductor cilíndrico com junções retorcidas em parafuso, gerando uma situação semelhante ao degrau potencial, podem acarretar na dinâmica da partícula, ao atravessá-lo.

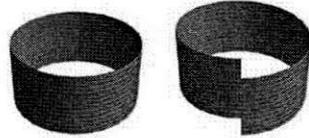


Figura 4.1: superfície cilíndrica com deslocação em parafuso

Refizemos os cálculos anteriores para um degrau potencial simples, levando em conta novamente a variação na massa efetiva da partícula, só que agora acrescentando os novos parâmetros da geometria. Partimos da teoria dos defeitos em meios elásticos, onde a geometria induzida por um deslocamento parafuso em uma amostra cilíndrica é dada pelo elemento de linha, onde os parâmetros de uma medida da magnitude do defeito e as coordenadas cilíndricas obedecer a identificação habitual, $(\rho, \varphi, z) \approx (\rho, \varphi + 2, z)$ e simplesmente produz-se a geometria deste espaço.

$$dl^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 + (dz + \kappa d\varphi)^2 \quad (4.0.1)$$

onde κ representa a medida da magnitude do defeito. Em nossa figura 4.1 o raio inicial da casca cilíndrica é R . Ao atribuírmos o parâmetro κ obtemos, portanto, um novo raio r com coordenada longitudinal para a área deslocada, segundo [17].

Observando-se a Equação 4.0.1 podemos escrever um novo elemento de linha equivalente, para a geometria bidimensional de uma concha cilíndrica com deslocação em parafuso

$$dl^2 = R^2 d\varphi^2 + (dz + \kappa d\varphi)^2 \quad (4.0.2)$$

onde o parâmetro R é o raio do cilindro, cujas coordenadas cilíndricas são: (φ, z) $(\varphi + 2, z)$. Definindo, portanto, o novo raio e uma nova coordenada longitudinal para a parte que contém o defeito, obtemos

$$r = \sqrt{R^2 + \kappa^2}; z' = \frac{z}{r} \sqrt{r^2 - \kappa^2} \quad (4.0.3)$$

que geram uma nova configuração para a expressão 4.0.2

$$dl^2 = r^2 + d\varphi^2 + \frac{r^2}{r^2 - \kappa^2} dz'^2 + \frac{2\kappa r}{\sqrt{r^2 - \kappa^2}} dz' d\varphi \quad (4.0.5)$$

uma nova variável de ângulo fora definida,

$$\theta = \varphi + \frac{\kappa z'}{r\sqrt{r^2 - \kappa^2}} \quad (4.0.6)$$

gerando a seguinte expressão

$$dl^2 = r^2 d\theta^2 + dz'^2 \quad (4.0.7)$$

onde as novas coordenadas cilíndricas são,

$$(\varphi, z') (\theta + 2, z^2) \quad (4.0.8)$$

o que nos leva à perceber a semelhança entre as geometrias, onde em uma casca cilíndrica de raio R e deslocamento parafuso para um parâmetro κ é geometricamente equivalente a uma casca comum com um raio $r = (R^2 + \kappa^2)^{1/2}$.

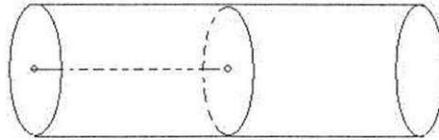


Figura 4.2: semiconductor cilíndrico com deslocação em parafuso (a linha tracejada representa o defeito gerador da torção helicoidal na estrutura.)

Nossa superfície trata-se de um cilindro contendo junções retorcidas semelhantes a um degrau potencial (figura 4.2). Podemos analisa-la, portanto, similarmente ao problema da partícula livre. Partimos das já conhecidas funções de onda, dadas respectivamente antes e depois do degrau por:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi_1}{\partial z'^2} + V_1 \psi_1 = E \psi_1 \quad (4.0.9)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi_2}{\partial z^2} + V_2 \psi_2 = E \psi_2 \quad (4.0.10)$$

organizando-as, afim de destacarmos os termos que representam os vetores

de onda da partícula, temos

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} + \left(\frac{2m'E}{\hbar^2} - \frac{2m'V_1}{\hbar^2} \right) \psi_1 = 0 \quad (4.0.11)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mV_2}{\hbar^2} \right) \psi_2 = 0 \quad (4.0.12)$$

sendo os potenciais antes e depois da junção, $V_1 = \frac{-\hbar^2}{8m(R^2 + \kappa^2)}$ e $V_2 = \frac{-\hbar^2}{8mR^2}$, de acordo com os trabalhos [16], podemos escrever os vetores de onda antes do degrau e após

$$k' = \sqrt{\frac{2m'E}{\hbar^2} + \frac{2m'(-\hbar^2)}{8m\hbar^2(R^2 + \kappa^2)}} \quad (4.0.13)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(-\hbar^2)}{8m\hbar^2 R^2}} \quad (4.0.14)$$

sabendo que a velocidade de grupo é dada pela relação

$$\nu' = \frac{k'}{m'} \quad (4.0.15)$$

$$\nu = \frac{k}{m} \quad (4.0.16)$$

e que neste problema, continuamos analisando o caso com massa variável, a qual assumirá a forma, $m' = \frac{m}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{R^2}}}$. Podemos, portanto, calcular os coeficientes R e T, através das relações

$$R = \frac{(\nu' - \nu)^2}{(\nu' + \nu)^2} \quad (4.0.17)$$

$$T = \frac{4\nu'\nu}{(\nu' + \nu)^2} \quad (4.0.18)$$

resultando, portanto, nas seguintes expressões para os coeficientes R e T, respectivamente

$$R = \frac{\left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right) \left[E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right] \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right)} - \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right] \right]^2}{\left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right) \left[E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right] \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right)} + \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right] \right]^2} \quad (4.0.19)$$

$$T = \frac{\left[4 \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right) \left[E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right] \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right)} - \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right] \right] \right]^2}{\left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right) \left[E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right] \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right)} + \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right] \right]^2} \quad (4.0.20)$$

onde nas equações acima, após alguns cálculos e simplificações, a grandeza $\frac{8mR^2E}{\hbar^2}$ foi considerada apenas possuindo dimensões de energia. Com isso, foram plotados os gráficos dos coeficientes de Transmissão (figura 4.3) e reflexão (figura 4.4), em função do acréscimo de energia, e percebeu-se que para alguns valores de energia, as curvas transmitem totalmente, fato este que coincidiu com as variações do defeitos para menores valores. Onde o inverso também foi observado, ou seja, para um parâmetro de defeito maior, menos transmissão e conseqüentemente, mais reflexão. Portanto, para valores críticos o contorno transforma-se de refletor para um transmissor.

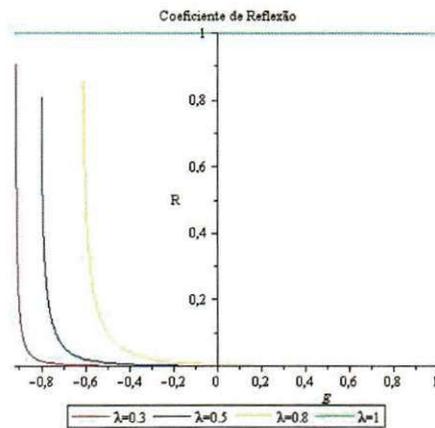


Figura 4.3: Gráfico da Reflexão em função da energia ϵ devido a variação no defeito κ .

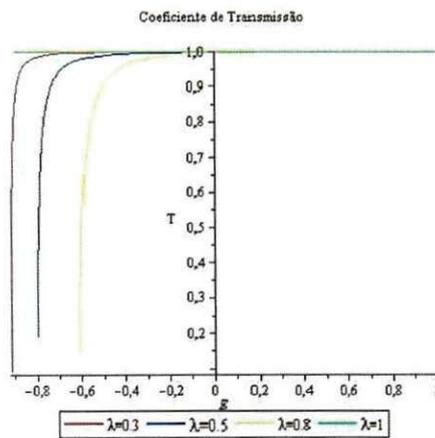


Figura 4.4: Gráfico da Transmissão em função da energia ϵ devido a variação no defeito κ .

Capítulo 5

Incidência de portadores em um Poço de potencial

Sistemas eletrônicos baseados em heteroestruturas de poços quânticos têm sido largamente utilizados para a confecção de diversos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, tais como fotodetectores, moduladores ópticos, transistores, lasers, etc [18]. Na Mecânica Quântica dentre as diversas heteroestruturas que podem ser produzidas através das técnicas de crescimento epitaxial, a de um poço quântico simples é certamente a mais pesquisada, a qual é um sistema composto de dois materiais semicondutores com “gaps” de energia diferentes e pode ser construído, por exemplo, crescendo-se uma camada de GaAs entre duas camadas de $Al_xGa_{1-x}As$. O $Al_xGa_{1-x}As$ possui um “gap” de energia maior que o GaAs e a estrutura criada forma uma região de confinamento bidimensional para os portadores

de cargas, com níveis de energia discretos e característicos desse poço em particular. Alterando-se a concentração de Al nas camadas de $Al_xGa_{1-x}As$, modifica-se o “gap” de energia do material, sendo possível, inclusive, controlar os níveis de energia dos elétrons e dos buracos no poço quântico [19][20].

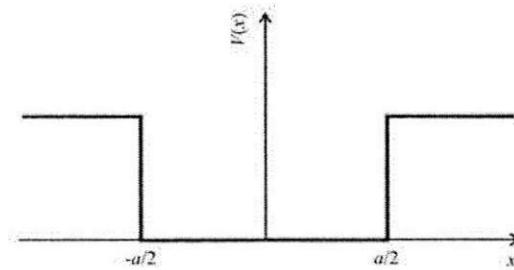


Figura 5.1: Poço Potencial Quântico simples

5.1 Poço Quântico (Caso: $E < V_0$)

Nesta seção relembremos o caso do poço potencial, cujas expressões são semelhantes as do problema da barreira potencial tratada anteriormente, em que a energia é maior que a altura da barreira; $E > V_0$. Temos portanto, um potencial nulo, que possui a solução para a função de onda na região interna igual a da partícula livre:

$$\psi(x) = F \exp(ikx) + G \exp(-ikx), -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (5.1.1)$$

Nas regiões externas a equação de Schrödinger tem a forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V_0 \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.1.2)$$

cujas soluções para antes e depois das barreiras são correspondentes também as da partícula livre

$$\psi(x) = A \exp(ik'x) + B \exp(-ik'x), x < \frac{-a}{2} \quad (5.1.3)$$

$$\psi(x) = C \exp(ika'x) + D \exp(-ik'x), x > \frac{a}{2} \quad (5.1.4)$$

com $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar}}$, consideramos o caso em que $D = 0$, que corresponde a uma onda incidente pela esquerda sobre o poço de potencial, Podendo serem determinadas a partir das soluções acima apresentadas, as constantes A, B, C, D F e G, igualando-se os valores das funções de onda e de suas derivadas em $x = \frac{a}{2}$ e $x = \frac{-a}{2}$, para cada condição de contorno, temos

$$\psi(x) = F \exp(ik\frac{a}{2}) + G \exp(-ik\frac{a}{2}) = C \exp(ik'x) \quad (5.1.5)$$

$$\psi(x) = F \exp(ik\frac{a}{2}) + G \exp(-ik\frac{a}{2}) = A \exp(ik'x) + B \exp(-ik') \quad (5.1.6)$$

Para $x = \frac{a}{2}$:

$$F \exp(ik\frac{a}{2}) + G \exp(-ik\frac{a}{2}) = C \exp(ik'\frac{a}{2}) \quad (5.1.7)$$

o que nos leva a determinar o coeficiente $\frac{F}{G}$,

$$\frac{F}{G} = \left(\frac{k+k'}{k-k'} \right) \exp(-ika) \quad (5.1.8)$$

com o uso da equação 5.1.8, para o caso em que $x = \frac{-a}{2}$ obtivemos a igualdade

$$\frac{\frac{F}{G} + \exp(-ika)}{\frac{F}{G} - \exp(-ika)} = \frac{k \frac{A}{B} + \exp(ik'a)}{k'' \frac{A}{B} - \exp(ik'a)} \quad (5.1.9)$$

O que nos permite calcular a razão $\frac{B}{A}$, a qual nos fornece o coeficiente de reflexão R. De maneira análoga, podemos obter também o coeficiente de transmissão T, através da relação $\frac{C}{A}$. Chegando aos resultados dos mesmos, expressos por

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (5.1.10)$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (5.1.11)$$

reescrevendo os coeficientes acima em termos dos vetores de onda k e k' , temos:

$$R = \left[1 + \frac{4k^2k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(ka)} \right]^{-1} \quad (5.1.12)$$

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(ka)}{4k^2k'^2} \right]^{-1} \quad (5.1.13)$$

sendo, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ e $k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar}}$, podemos obter ainda para as expressões acima

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(\kappa a)} \right]^{-1} \quad (5.1.14)$$

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(\kappa a)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1} \quad (5.1.15)$$

Uma partícula incidente em um poço de potencial com $E > V_0$ pode ser transmitida ou refletida, exatamente como no caso da barreira de potencial. Os coeficientes de reflexão e transmissão apresentam oscilações de acordo com a energia da partícula incidente, assim como vimos também o transporte coerente de elétrons em estruturas cilíndricas é diretamente influenciado por pequenas alterações no raio da estrutura, devido a inserção de defeitos [21]. Podemos, portanto, verificar a partir das Equações (5.1.13) e (5.1.14), que $R + T = 1$, o que nos dá a probabilidade da partícula atravessar a barreira. Observamos também, com isso, que o coeficiente de transmissão T é, em geral, menor do que 1, em contradição com a situação clássica, em que a partícula é sempre transmitida. Um ponto interessante para se chamar a atenção é que as oscilações no coeficiente de transmissão são de $T = 1$ quando $\kappa a = n\pi$, ou seja, ocorre transmissão sempre quando a espessura do poço de potencial é igual a um múltiplo inteiro da metade do comprimento de onda da partícula dentro do poço, $\lambda = \frac{2\pi}{\kappa}$.

5.2 Geometria cilíndrica com deslocação em Parafuso, aplicada ao poço quântico

Os cálculos feitos na seção anterior (5.1) para os coeficientes de reflexão e transmissão de uma partícula em um poço quântico, foram repetidos nesta seção. Neles utilizamos os mesmo parâmetro κ , do defeito em parafuso, analisado no capítulo 4 e do mesmo modo, consideramos a variação na massa e sua influência nas velocidades de grupo ν e ν' , para o caso de uma barreira potencial, abordadas no Capítulo 3. Devido à semelhança de suas expressões para os coeficientes T e R com as do poço potencial.

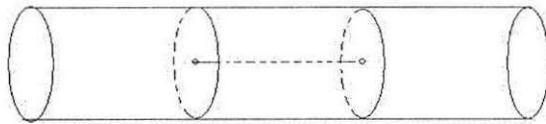


Figura 5.2: semiconductor cilíndrico com deslocamento parafuso (semelhante ao poço quântico)

Sabendo que os potenciais antes e depois da junção, são $V_1 = \frac{-\hbar^2}{8m(R^2 + \kappa^2)}$ e $V_2 = \frac{-\hbar^2}{8mR^2}$, [16], e que $m' = \frac{m}{\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{R^2}}}$ representa a massa variável da partícula. Então os vetores de onda serão

$$k' = \sqrt{\frac{2m'E}{\hbar^2} + \frac{2m'(-\hbar^2)}{8m\hbar^2(R^2 + \kappa^2)}} \quad (5.2.16)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(-\hbar^2)}{8m\hbar^2 R^2}} \quad (5.2.17)$$

o que nos traz as seguintes configurações para as velocidades de grupo

$$\nu' = \frac{k'}{m'} \quad (5.2.18)$$

$$\nu = \frac{k}{m} \quad (5.2.19)$$

Portanto, já conhecendo as expressões para os coeficientes de reflexão e transmissão para o poço, dadas respectivamente por

$$R = \left[1 + \frac{4kk'^2}{(k^2 - k'^2)^2} \sin^2(k'a) \right]^{-1} \quad (5.2.20)$$

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2}{4kk'^2} \sin^2(k'a) \right]^{-1} \quad (5.2.21)$$

podemos então, reescreve-las em termos das velocidades de grupo, as quais dependem das massas e dos vetores de onda, contendo os potenciais relacionados ao defeito atribuído

$$R = \left[1 + \frac{4\nu'^2\nu^2}{(\nu^2 - \nu'^2)^2} \sin^2(k'a) \right]^{-1} \quad (5.2.22)$$

$$T = \left[1 + \frac{(\nu'^2 - \nu^2)^2}{4\nu^2\nu'^2} \sin^2(k'a) \right]^{-1} \quad (5.2.23)$$

o que resulta nas expressões

$$R = \left[1 + \frac{4 \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right)} \left(E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right) \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right) \right]^2 \left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right)^2}{\left(\left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right)} \left(E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right) \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right) \right)^2 - \left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right)^2 \right)^2} \sin^2(k' a) \right]^{-1} \quad (5.2.24)$$

$$T = \left[1 + \frac{\left(\left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right)} \left(E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right) \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right) \right)^2 - \left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right)^2 \right)^2}{4 \left[\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}\right)} \left(E + \frac{\hbar^2}{8m(R^2+\kappa^2)} \right) \left(\frac{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{R^2}}}{m} \right) \right]^2 \left(\sqrt{\frac{2}{\hbar^2} m \left(E + \frac{\hbar^2}{8mR^2} \right) \frac{1}{m}} \right)^2} \sin^2(k' a) \right]^{-1} \quad (5.2.25)$$

onde nas equações acima, para o termo dependente do seno, foram considerados os fatores $(a = \pi \hbar (mV_2)^{1/2})$ (largura do poço) e o vetor de onda na região do defeito k' :

$$k' = \sqrt{\frac{2m'E}{\hbar^2} + \frac{2m'(-\hbar^2)}{8m\hbar^2(R^2 + \kappa^2)}} \quad (5.2.26)$$

Com os quais foram plotados os gráficos para os coeficientes de Reflexão figura (5.3) e transmissão figura (5.4), em função da Energia. O que evidenciou mais uma vez que, para as curvas onde foram atribuídos menores valores para o parâmetro κ do defeito, maior é a probabilidade de transmissão total da partícula, e as curvas se distanciam cada vez mais do valor um, tendenciando apenas à reflexão. Assim como, para menores valores de defeitos, observou-se uma aproximação da situação sem defeito, cuja transmissão é cem por cento e por isso, gera uma maior quantidade de picos das

curvas tendendo ao valor um.

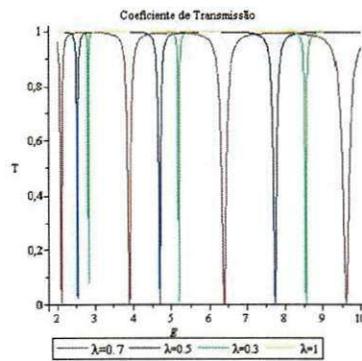


Figura 5.3: Coeficiente de Transmissão em função da energia, para portadores em um poço potencial com deslocação parafuso.

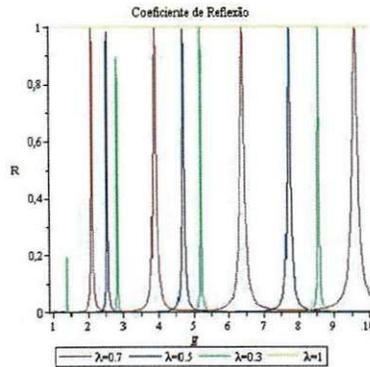


Figura 5.4: Coeficiente de Reflexão em função da energia, para portadores em um poço potencial com deslocação parafuso.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho pudemos analisar o comportamento de partículas quânticas confinadas em semicondutores cilíndricos contendo defeitos em sua geometria. Percebendo, portanto, a influência dos mesmos nas propriedades dos coeficientes de transmissão e reflexão dos portadores ao deslocarem-se por tais estruturas. Estudamos as variações destes coeficientes de acordo com o acréscimo da energia e aumento do defeito atribuído à estrutura. Verificamos comportamentos esperados semelhantes aos já conhecidos em termos da probabilidade da transmissão total da partícula. No caso estudado, observamos as mudanças ocorridas de acordo com o aumento ou diminuição do defeito κ no raio de uma estrutura cilíndrica semicondutora, constatando que o defeito comporta-se como estruturas quânticas conhecidas como degraus potenciais, poços quânticos, barreiras e etc. E que este tipo de comporta-

mento, assemelha-se a junções Pns, que estão presentes em nanodispositivos eletrônicos. Com isto, compreendemos a importância tecnológica que a manipulação de sistemas quânticos regidos pela topologia, possui, devido à mesma possibilitar a produção futura de nanodispositivos com funcionamento baseado na geometria de defeitos. Como perspectivas futuras, sugerimos a análise dos efeitos que este tipo de defeito geométrico (deslocação em parafuso) pode causar na dinâmica de partículas confinadas em outras estruturas quânticas. Um bom exemplo a servir de estudo é a barreira de potencial quadrada, anti-simétrica entre duas paredes rígidas [22].

Referências Bibliográficas

- [1] A. B. Fowler, A Semicentury of Semiconductors, *Physics Today*, Outubro (1993) 52 – 62.
- [2] H. Ehrenreich, Strategic Curiosity: Semiconductor Physics in the 1950s *Physics Today*, Janeiro (1995) 28 – 34.
- [3] K. V. R. A. Silva et al, *Eur Phys. J. B* 86(2013) 147.
- [4] M. O. Katanaev arXiv:cond-mat/0502123v1 [cond-mat.mtrl-sci](2005).
- [5] C. Filgueiras and B. F. Oliveira, *Ann. Phys.* 523 (2011) 898 – 909.
- [6] H. Taira and H. Shima, *Surface Science* 601 (2007) 5270 – 5275.
- [7] V. Atanasov, R. Dandoloﬀ, *Physics Letters A* 372 (2008) 6141 – 6144.
- [8] K. Kawamura, *Zeitschrift für Physik B* 29 (1978) 101.
- [9] A.M. DE, M. Carvalho, C. Sàtiro, F. Moraes, *European Physical Letters* 80 (2007)46002.
- [10] Y. Aharonov, D. Bohm, *Physical Review* 115 (1959) 485.

- [11] S. M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos* (2004) 93 – 174.
- [12] D. M. Ashcroft, *Física do Estado Sólido* (2011).
- [13] K. Charles, *Introdução À física do Estado Sólido* (2006)
- [14] M. J. R. Pinheiro, *Mecânica Quântica* (2011) 53 – 69.
- [15] J. M.L. Leblond, *Eur. J. Phys.* 13 (1992) 215 – 218.
- [16] R. C. T. da Costa, *PHYSICAL REVIEW A*, vol 23, n4, Abril (1981).
- [17] V. A. De Lorenci, E. S. Moreira Jr, *Physics Letters A* 376 (2012) 2281 – 2282.
- [18] E. M. Lopes et al, vol 31, n2 (2010) 107 – 118.
- [19] S. A. LOURENÇO et al, *The European Physical Journal*, B 21 (2001) 11 – 17.
- [20] S. A. LOURENÇO et al, *Journal of Applied Physics*, 89 (2001) 6159 – 6164.
- [21] A. Marchi, S. Reggiani and M. Rudan, *J Coput Electron*, (2006) 5: 177-180.
- [22] Z. Ahmed arXiv:1406.4761v1 [quant-ph](2014)