

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
ESCOLA DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA E  
DE COMPUTAÇÃO

*Aplicações do Método Variacional na Engenharia de  
Dispositivos Semicondutores.*

Rodrigo Alves Moreira

Orientador: PhD. Paulo César Miranda Machado

Goiânia

2007

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

**Rodrigo Alves Moreira**

*Aplicações do Método Variacional na Engenharia de  
Dispositivos Semicondutores.*

Dissertação apresentada ao curso de Mestrado em Engenharia Elétrica e de Computação da Escola de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Federal de Goiás, para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e de Computação.

**Área de concentração:** Engenharia de Computação.

Orientador: PhD. Paulo César Miranda Machado

Goiânia

2007

Dissertação de Mestrado sob o título “*Aplicações do Método Variacional na Engenharia de Dispositivos Semicondutores*”, defendida por Rodrigo Alves Moreira e aprovada em de Abril de 2007, em Goiânia, Goiás, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

---

Prof. PhD. Paulo César Miranda Machado - Orientador (EEEC/UFG)

---

Prof. Dr. Cloves Gonçalves Rodrigues - Efetivo (UCG)

---

Prof. Dr. Norton Gomes de Almeida - Suplente (UCG)

---

Prof. Dr. Euler Bueno dos Santos - Efetivo (EEEC/UFG)

---

Prof. Dr. Francisco Aparecido P. Osório - Suplente (EEEC/UFG)

*Dedico esta dissertação a meus pais,  
cujo exemplo de honestidade, humildade e trabalho  
tem sido a base dos princípios de minha vida,  
e para minha esposa, que tem  
me dado apoio nos momentos mais difíceis  
mostrando-se uma dedicada companheira.*

# *Agradecimentos*

Dedico meus sinceros agradecimentos para:

– a CAPES por ter me beneficiado com uma bolsa de estudos na qual contribuiu muito para realização deste trabalho;

– a Universidade Federal de Goiás e ao professor PhD. Paulo César Miranda Machado, pela orientação, incentivo e confiança depositada em mim;

– o professor doutor Francisco Aparecido P. Osório, pela oportunidade dada a mim de iniciar nas pesquisas sobre dispositivos semicondutores, motivo pelo qual fiz este trabalho;

– a minha esposa Vivian, por ter me apoiado durante todo período deste trabalho;

– todos os colegas do Mestrado em Engenharia Elétrica e de Computação, especialmente Ana Rosa Cruz, pela colaboração computacional;

– a meus pais por terem sido um bom exemplo de perseverança e luta, e assim contribuíram na minha formação de caráter e personalidade, motivos pelo qual tornei o homem que sou hoje;

– por fim agradeço a Deus pelas pessoas que tive oportunidade de conhecer na comunidade acadêmica e pela força que elas me deram para que este trabalho fosse concluído.

*“É mais freqüente que a confiança seja gerada pela ignorância do que pelo conhecimento: são os que conhecem pouco, e não os que conhecem muito, os que afirmam tão positivamente que este ou aquele problema nunca será solucionado pela ciência.*

*Charles Darwin, introdução, The descent of man (1871)*

# *Resumo*

Neste trabalho será apresentado o Método Variacional, o qual foi utilizado para resolver problemas da mecânica quântica que aparecem comumente em simulações de dispositivos semicondutores, tais como: o cálculo da densidade de estado de impureza doadora em poços quânticos com alturas de barreiras de potencial finito e infinito e na obtenção dos níveis de energias para um elétron confinado em um fio quântico cilíndrico com alturas de barreiras de potencial infinito. Para obter as energias de um elétron em estruturas de poços quânticos e em seguida determinar a densidade de estado de impureza, foram escolhidas duas funções de ondas simples, uma com forma Gaussiana e outra com forma Hidrogenóide. Foi considerado primeiramente as alturas de barreiras de potencial do poço quântico como sendo infinito, e depois foi generalizado para um caso realista com alturas de barreiras de potencial finito, a fim de comparar os resultados obtidos.

Para o cálculo dos níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com alturas de barreiras de potencial infinito, também foram escolhidas funções de ondas com formas Gaussianas ou Hidrogenóides com uma variável dependente de uma função de Bessel ou de uma função Hipergeométrica Confluente para a aplicação do Método Variacional. Ainda para o fio quântico, foi utilizado outro método de resolução: o Método Variacional e de Perturbação que transforma um problema de três dimensões em um de duas dimensões ou até mesmo de uma dimensão, com isto foi possível obter um segundo parâmetro de comparação com o Método Variacional.

**Palavras chaves:** (1) Semicondutor, (2) Equação de Schroedinger, (3) Função Hipergeométrica Confluente, (4) Função de Bessel, (5) Método Variacional, (6) Método Variacional e de Perturbação.



# *Abstract*

In this work is presented the Variational Method, which is used to solve quantum mechanic problems that commonly appear in simulations of semiconductor devices, such as: the calculation of the donor impurity state density in quantum wells with finite and infinite potential barrier heights and in obtaining the energy levels of a confined electron in a cylindrical quantum wire with infinite potential barrier height. In order to obtaining the energies of an electron in quantum well structures and calculating the impurity state density, two simple wave functions were chosen, one with Gaussian form and the other with Hidrogenic form. First, it was considered a quantum well with infinite potential barrier heights, and then it was generalized for a more realistic case with finite potential barrier heights, and both obtained results were compared.

For the calculation of the energy levels of a confined electron in a quantum wire with infinite potential barrier heights by using the Variational Method the waves functions were chosen with Gaussian or Hidrogenic forms dependent on Bessel's function or the Confluent Hypergeometric function. Still for the quantum wire, it was used another method of resolution: the Perturbation and Variational Method that transforms a problem of three dimensions into one problem of two dimensions or even in a problem of one dimension, allowing to obtain another parameter of comparison with the Variational Method.

**Key Words:** (1) Semiconductor, (2) Schroedinger's Equation, (3) Confluent Hypergeometric function, (4) Bessel's function, (5) Variational Method, (6) Perturbation and Variational Method.

# *Sumário*

## **Lista de Figuras**

## **Lista de Tabelas**

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>17</b>
<b>2</b>	<b>Método Variacional</b>	<b>22</b>
2.1	Introdução . . . . .	22
2.1.1	Fundamentos do Método . . . . .	22
2.1.2	Aplicação e Consistência do Método Variacional . . . . .	24
2.1.3	Comportamento da Função de Onda . . . . .	26
2.1.4	Escolha da função tentativa . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Densidade de Estados em Poços Quânticos</b>	<b>27</b>
3.1	Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Infinito . . . . .	27
3.1.1	Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa . . . . .	28
3.2	Segunda Função de Onda Escolhida Como Tentativa . . . . .	33
3.3	Poço Quântico Com Alturas de Barreiras de Potencial Finito. . . . .	35
3.3.1	Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa . . . . .	36
3.3.2	Segunda Função de Onda Escolhida Como Tentativa . . . . .	41
3.4	Resultados . . . . .	42
3.4.1	Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Infinito. . . . .	42
3.4.2	Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Finito. . . . .	60

<b>4 Fio Quântico na Presença de Campo Magnético Aplicado</b>	<b>87</b>
4.1 Cálculo dos Níveis de Energia Para o Fio Quântico . . . . .	87
4.1.1 Método Variacional e de Perturbação . . . . .	89
4.1.2 Determinação da Função $Z(z)$ . . . . .	89
4.1.3 Determinação da Função $\chi(\rho)$ . . . . .	91
4.2 Níveis de Energias pelo Método Variacional . . . . .	95
4.2.1 Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa . . . . .	95
4.2.2 Segunda Função de onda Escolhida como Tentativa . . . . .	99
4.3 Resultados . . . . .	101
4.3.1 Níveis de Energias Por Meio do Método Variacional e de Perturbação .	101
4.3.2 Níveis de Energias Por Meio do Método Variacional. . . . .	106
4.3.3 Comparação dos Resultados Obtidos Para os Níveis de Energia . . . .	110
<b>Conclusões</b>	<b>112</b>
<b>Referências</b>	<b>114</b>
<b>Apêndice A – Apêndice A - Solução Analítica da Equação de Schroedinger para um Poço de Potencial Quadrado</b>	<b>116</b>
<b>Apêndice B – Apêndice B - Determinação do Vetor Potencial A em Termos do Campo Magnético Aplicado.</b>	<b>119</b>

# *Lista de Figuras*

1.1	Representação de um poço quântico confeccionado a partir de materiais semi-condutores. . . . .	18
1.2	Representação de Heterojunção de $Al_xGa_{1-x}As$ e $GaAs$ . . . . .	18
1.3	fio quântico de $GaAs$ envolvido por $Al_xGa_{1-x}As$ . . . . .	19
1.4	Representação da construção de pontos quânticos por processo de litografia e corrosão química. . . . .	20
2.1	Variação da energia em função do parâmetro variacional $\alpha$ , para as funções 1, 2 e 3. . . . .	25
2.2	Funções de ondas correspondentes às funções 1, 2 e 3. . . . .	26
3.1	Representação de um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito. . . . .	27
3.2	Poço quântico finito em coordenadas cilíndricas, com o elétron ligado a impureza . . . . .	35
3.3	Energia em função da largura do poço quântico para a impureza localizada no centro do poço $z_i = 0$ . . . . .	44
3.4	Energia de ligação em função da largura do poço quântico para a impureza localizada no centro do poço $z_i = 0$ . . . . .	47
3.5	Energia em função da largura do poço quântico para a impureza localizada na borda do poço $z_i = L/2$ . . . . .	48
3.6	Energia de ligação em função da largura do poço quântico para a impureza localizada na borda do poço $z_i = L/2$ . . . . .	51
3.7	Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para $L = 20\text{Å}$ . . . . .	52
3.8	Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para $L = 100\text{Å}$ . . . . .	53
3.9	Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para $L = 300\text{Å}$ . . . . .	54
3.10	Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para $L = 500\text{Å}$ . . . . .	56
3.11	Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para $L = 1000\text{Å}$ . . . . .	57

3.12	Densidade de estado de impureza em função da energia de ligação normalizada para $L = 20\text{Å}$ , $L = 100\text{Å}$ e $L = 500\text{Å}$ . . . . .	59
3.13	Energia $E$ para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função I e $z_i = 0$ . . . . .	61
3.14	Energia $E$ para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função II e $z_i = 0$ . . . . .	62
3.15	Energia $E_{lig}$ para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função I e $z_i = 0$ . . . . .	66
3.16	Energia $E_{lig}$ para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função II e $z_i = 0$ . . . . .	67
3.17	Energia de ligação para diferentes potenciais em função da largura do poço e $z_i = L/2$ referente a função I. . . . .	68
3.18	Energia de ligação para diferentes potenciais em função da largura do poço e $z_i = L/2$ referente a função II . . . . .	69
3.19	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 20\text{Å}$ referente a função I. . . . .	73
3.20	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 20\text{Å}$ referente a função II. . . . .	74
3.21	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 100\text{Å}$ referente a função I. . . . .	76
3.22	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 100\text{Å}$ referente a função II. . . . .	79
3.23	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 500\text{Å}$ referente a função I. . . . .	81
3.24	Energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para diferentes alturas potencial e $L = 500\text{Å}$ referente a função II. . . . .	82
3.25	Densidade de estados de impureza em função da energia de ligação normalizada $E_{lig}/E_{lig}max$ para $L = 100\text{Å}$ e diferentes alturas de potencial referente a função II. . . . .	85
4.1	Fio quântico com campo magnético aplicado ao longo do eixo $z$ . . . . .	87
4.2	Lambda em função do raio para vários valores de campo magnético aplicado. . . . .	103

4.3	Energia em função do raio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	104
4.4	Energia $E_{Bessel}$ em função do raio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	107
4.5	Energia $E_{Hip}$ em função do raio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	108
4.6	Energias $E_\lambda$ , $E_{Hip}$ e $E_{Bessel}$ em função do raio e para $\gamma = 1, 5$ . . . . .	110
A.1	Poço quântico de potencial quadrado de largura $L$ e altura $V_0$ . . . . .	116
B.1	Fio quântico cilíndrico em coordenadas cartesianas com campo magnético aplicado ao longo do eixo $z$ . . . . .	119

## *Lista de Tabelas*

3.1	Constantes. . . . .	43
3.2	Energias em função da largura do poço quântico para impureza localizada no centro $z_i = 0$ , obtidas com a primeira função. . . . .	45
3.3	Energias em função da largura do poço quântico para impureza localizada no centro $z_i = 0$ obtidas com a segunda função. . . . .	46
3.4	Energias em função da largura do poço quântico para a impureza na borda do poço $z_i = L/2$ obtidas com a primeira função. . . . .	49
3.5	Energias em função da largura do poço quântico para a impureza na borda do poço $z_i = L/2$ obtidas com a segunda função . . . . .	50
3.6	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 20\text{Å}$ obtidas com a primeira função. . . . .	52
3.7	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 20\text{Å}$ obtidas com a segunda função. . . . .	53
3.8	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 100\text{Å}$ obtidas com a primeira função. . . . .	54
3.9	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 100\text{Å}$ obtidas com a segunda função. . . . .	54
3.10	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 300\text{Å}$ obtidas com a primeira função. . . . .	55
3.11	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 300\text{Å}$ obtidas com a segunda função. . . . .	55
3.12	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 500\text{Å}$ obtidas com a primeira função. . . . .	57
3.13	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 500\text{Å}$ obtidas com a segunda função. . . . .	57

3.14	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 1000\text{Å}$ obtidas com a primeira função. . . . .	58
3.15	Energias em função da posição $z_i$ da impureza para $L = 1000\text{Å}$ obtidas com a segunda função. . . . .	58
3.16	Energias em função da largura do poço para $z_i = 0$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	63
3.17	Energias em função da largura do poço para $z_i = 0$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	64
3.18	Energias em função da largura do poço para $z_i = 0$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	65
3.19	Energias em função do raio para $z_i = L/2$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	70
3.20	Energias em função do raio para $z_i = L/2$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	71
3.21	Energias em função do raio para $z_i = L/2$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	72
3.22	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	75
3.23	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	75
3.24	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	75
3.25	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	75
3.26	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	76
3.27	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 20\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	76
3.28	Energias em função da largura do poço para $z_i = 0$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	77



3.29	Energias em função do raio para $z_i = L/2$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com as funções I e II. . . . .	78
3.30	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	80
3.31	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	80
3.32	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	80
3.33	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	80
3.34	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	81
3.35	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 100\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	81
3.36	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	83
3.37	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 11,19R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	83
3.38	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	83
3.39	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 23,34R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	84
3.40	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a primeira função. . . . .	84
3.41	Energias e densidades de estados de impurezas para $L = 500\text{Å}$ e potencial $V_0 = 36,46R_y^*$ obtidas com a segunda função. . . . .	84
4.1	$\lambda$ em função do raio do fio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	104
4.2	Energia em função do raio do fio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	105
4.3	Energia $E_{Bessel}$ em função do raio para vários valores de $\gamma$ . . . . .	107
4.4	Energia $E_{Hip}$ em função do raio para vários valores $\gamma$ . . . . .	109

4.5 Energia  $E_\lambda$ ,  $E_{Hip}$  e  $E_{Bessel}$  em função do raio e para  $\gamma = 1,5$ . . . . . 111

# 1 *Introdução*

Na década de 40, com o surgimento dos primeiros mecanismos eletrônicos baseados nas válvulas termoiônicas e nos relés eletro-mecânicos, foi que se despontou uma real necessidade de se investir mais nos estudos voltados para os materiais semicondutores, a fim de substituir alguns mecanismos por outros mais eficientes, como é o caso das válvulas termoiônicas por exemplo, por serem muito frágeis, caras e com alto consumo de energia. Daí então os avanços e as novas descobertas no campo dos materiais semicondutores foram se tornando cada vez mais evidentes a cada década que se passava.

Os materiais semicondutores mais utilizados de início, foram o germânio e o silício, que constituíam a base dos estudos sobre junções p-n em semicondutores e da fabricação de transistor bipolar (SHOCKLEY, 1949), no qual teve um modelo proposto pela primeira vez por (SHOCKLEY, 1951) que construiu em 1952 um transistor de efeito de campo, do tipo JFET (Junction Field-Effect-Transistor) capaz de controlar a passagem de corrente elétrica pelo canal por meio de uma junção p-n, porém este dispositivo semiconductor veio a ser melhorado com um estudo mais detalhado sobre transistor bipolar de heterojunção (HBT- Heterostructure Bipolar Transistor) tornando-se um dos dispositivos mais rápidos da atualidade.

Outro material utilizado na confecção de heteroestruturas semicondutoras foi o arseneto de gálio *GaAs* que através de uma simples junção p-n deu origem na década de 60 aos primeiros lasers de emissão lateral. Os mais recentes dispositivos eletrônicos feitos a partir de materiais semicondutores, estão se tornando cada vez mais eficientes graças aos estudos de heteroestruturas, tais como poços quânticos Figura 1.1, fios quânticos Figura 1.3 e pontos quânticos Figura 1.4, que possibilitam a investigação das propriedades eletrônicas em ambientes com dimensão inferior a três (OSÓRIO; HIPÓLITO; PEETERS, 2005). Do ponto de vista teórico e acadêmico este fato de testar nossas teorias e criar novas em outros espaços, é de importância fundamental e nos levará a descobertas de novos fenômenos, que após entendidos representarão um grande desenvolvimento na física de estado sólido e possibilitarão a fabricação de dispositivos eletrônicos mais eficientes, tais como geradores de luz laser, transistores e processadores que são largamente utilizados na área de telecomunicações, bem como telefone celular, televisão, sistema

digital e outros equipamentos.

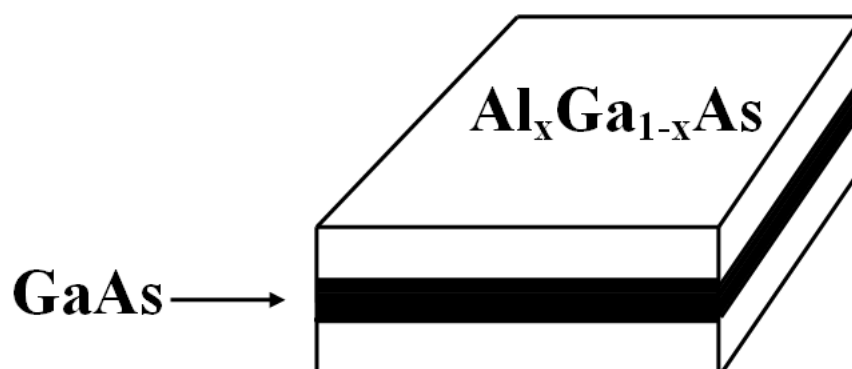


Figura 1.1: Representação de um poço quântico confeccionado a partir de materiais semicondutores.

Poços Quânticos (EISBERG; RESNICK, 1979) são heteroestruturas semicondutoras confeccionadas a partir de camadas de diferentes materiais, como por exemplo: arseneto de gálio ( $GaAs$ ) e arseneto de gálio e alumínio  $Al_xGa_{1-x}As$ , onde a concentração  $x$  de alumínio determina a diferença de energia "gap" entre as bandas de valência e de condução dos materiais. Esta variação entre os "gaps" de energia faz surgir nas interfaces dos dois materiais abruptas diferenças de potencial, formando assim um perfil de poço quântico triangular 1.2a e quadrado 1.2b. Este fator leva os elétrons da banda de condução do material a ficarem confinados na região de menor potencial ( $GaAs$ ) e isto contribui para uma série de aplicações na engenharia dos dispositivos semicondutores, pois os elétrons confinados possuem níveis de energia discretos, como previsto pela Mecânica Quântica.

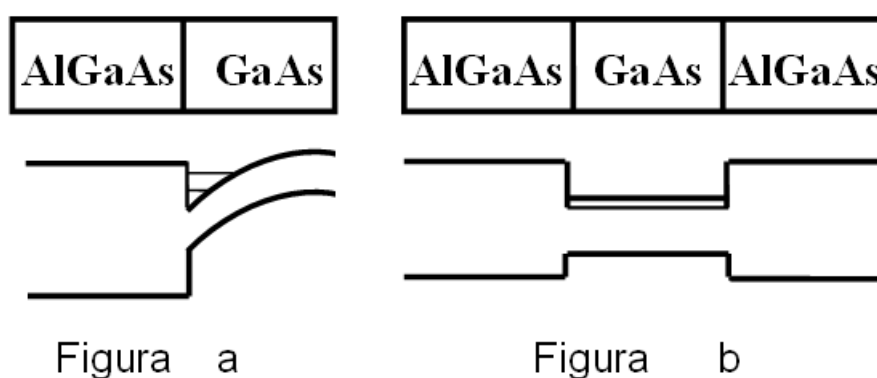


Figura 1.2: Representação de Heterojunção de  $Al_xGa_{1-x}As$  e  $GaAs$ .

Pode-se realizar o confinamento de  $GaAs$  por meio de  $Al_xGa_{1-x}As$  em duas dimensões, com isto produz-se uma diferença de potencial na região do  $GaAs$  de modo a submeter o gás de elétrons presente a um potencial de confinamento extra, que restringe seu movimento ao longo de uma direção, perpendicular à direção de crescimento, produzindo assim o chamado fio quântico como mostra a Figura 1.3 a seguir. A aplicação de campos magnéticos neste tipo de estrutura é de suma importância na busca de novos e melhores dispositivos semicondutores, porém se o gás de elétron for confinado em todas as direções, tem-se os chamados pontos quânticos (OSÓRIO; HIPÓLITO; PEETERS, 2005) como mostra a Figura 1.4.

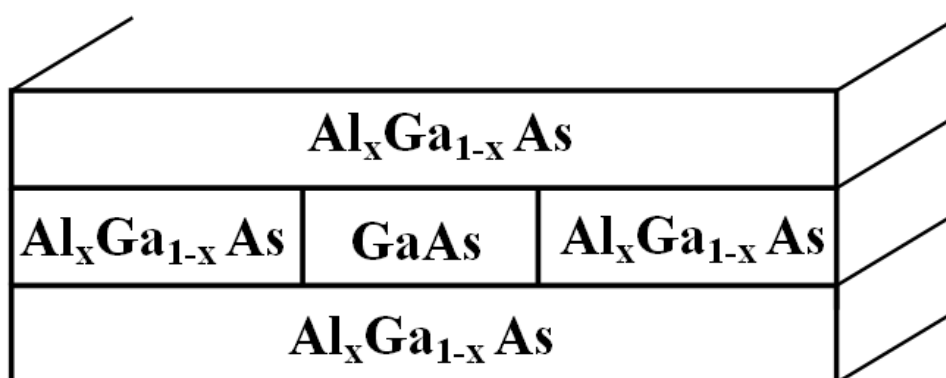


Figura 1.3: fio quântico de  $GaAs$  envolvido por  $Al_xGa_{1-x}As$ .

O ponto quântico, abreviado comumente por  $QD$ , do inglês quantum dot, é uma nanoestrutura pontual, uma pequena ilha de um material com um certo "gap" sobre a superfície de um outro material de "gap" maior. Dessa forma, os elétrons em um número limitado ficam confinados no interior do material nas três direções, e têm sua energia quantizada em valores discretos, como em um átomo, por isto são comumente chamados de átomos artificiais devido ao fato deles formarem uma classe de estruturas artificiais semelhantes aos átomos, porém com energia de excitação de várias ordens de magnitude menores que as dos átomos tradicionais com a vantagem de que o número de elétrons pode ser controlado. Os avanços tecnológicos que envolvem as aplicações de pontos quânticos em dispositivos semicondutores tem sido constantes, e inúmeros trabalhos já foram desenvolvidos nesse sentido, pois nos dias atuais há uma necessidade em se acumular um número cada vez maior de informações em ambientes de dimensões cada vez menores e como o ponto quântico é uma estrutura semicondutora com um diâmetro muito pequeno, podendo ter suas dimensões comparadas ao comprimento de onda de Broglie (EISBERG; RESNICK, 1979), da ordem de alguns nanômetros, ele vem se tornando um assunto muito estudado na área da física de semicondutores.

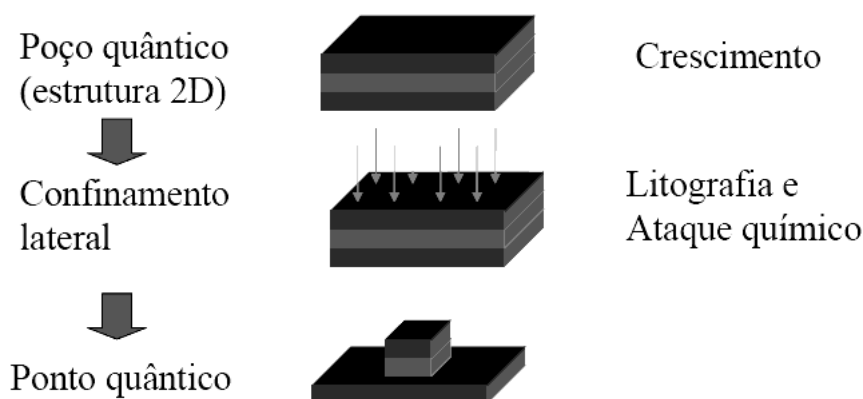


Figura 1.4: Representação da construção de pontos quânticos por processo de litografia e corrosão química.

O processo de formação dos pontos quânticos pode-se dar pela técnica de litografia (ALVES; RONCONI, 2002), associada ao processo de corrosão química como mostrou a Figura 1.4, mas para outros materiais como o *InAs* – *InGaAs* por exemplo, pode ser utilizada a técnica de auto organização, que consiste basicamente na redistribuição espontânea do *InAs* sobre o substrato de *InGaAs*, onde existe uma diferença de parâmetro de rede de 7,2% fazendo com que o crescimento seja realizado sob tensão. As propriedades e características destas estruturas tem atraído nos últimos anos, a atenção de muitos estudiosos na área dos dispositivos semicondutores, pois apresentam perspectivas em novas aplicações tecnológicas, tais como os futuros computadores quânticos.

Muitos trabalhos têm sido desenvolvidos a fim de entender e controlar melhor as propriedades eletrônicas destes materiais, com esta finalidade são utilizadas diferentes formas geométricas (BELLA; NAVANEETHAKRISHNAN, 2004). Geralmente o modelo mais utilizado nos estudos de pontos quânticos é que os elétrons no interior dos pontos quânticos não consigam escapar, o que corresponde a um modelo de barreiras de potencial de altura infinita, e este tipo de aproximação leva a uma simplificação dos cálculos, fornecendo assim uma visão qualitativa do sistema.

Um outro fator relevante nos estudos dos dispositivos semicondutores é a presença de impurezas doadoras (OSÓRIO; HIPÓLITO; PEETERS, 1993), isto é fundamental nas estruturas de semicondutores, pois a presença de impureza limita a mobilidade eletrônica, por isso é um assunto de grande importância que tem sido muito estudado pelos pesquisadores da área de Física de semicondutores e por engenheiros ligados à área. No entanto os estudos sobre dispositivos semicondutores dopados com impureza doadora tem uma limitação que dificulta os avanços teóricos, pois para entender melhor o comportamento dos elétrons dentro destas estruturas é preciso determinar uma função de onda associada a essas partículas, para isto devemos resolver

a equação de Schroedinger (EISBERG; RESNICK, 1979), que é uma equação diferencial parcial de segunda ordem, mas que no caso da presença de impureza, não possui variáveis separáveis, impossibilitando assim a determinação da função de onda, porém existem outros métodos que contornam este problema, como é o caso do Método Variacional (WALDEMAR, 2002).

O objetivo deste trabalho é aplicar o Método Variacional, no cálculo da densidade de estado de impurezas doadoras em estruturas de poços quânticos, utilizando funções de ondas simples com formas Gaussianas ou Hidrogenóides para um elétron ligado a uma impureza, e na determinação dos níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico, com um campo magnético aplicado na direção de crescimento do fio. Para este segundo caso iremos comparar o Método Variacional (WALDEMAR, 2002) com o Método Variacional e de Perturbação (NICULESCO et al., 2001), verificando assim a eficiência destes métodos.

A dissertação está organizada da seguinte maneira: no capítulo 2, será apresentado o Método Variacional e por meio de uma aplicação, será explicado em que se baseia o método. No capítulo 3, Serão calculadas por meio do Método Variacional as densidades de estados de impureza doadora em estruturas de poços quânticos com barreiras de potencial finito e infinito. No capítulo 4, para calcular os níveis de energias envolvendo um fio quântico de barreira de potencial infinito na presença de campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ , será utilizado o Método Variacional e de Perturbação para comparar os resultados com o Método Variacional. Por fim, na conclusão, será resumida toda a dissertação desenvolvida e indicação de possíveis trabalhos futuros que possam melhorar os estudos na área de semicondutores.

## 2 *Método Variacional*

### 2.1 Introdução

Devido às dificuldades em se obter as funções de ondas para certos problemas que não possuem variáveis separáveis é que surgiram as necessidades da aplicação do Método Variacional (WALDEMAR, 2002), que consiste em fazer uso de uma função escolhida de forma convencional como tentativa. Por não se conhecer a função de onda  $\psi$ , associada ao elétron, escolhe-se funções tentativas  $\varphi$  que irão conter parâmetros denominados variacionais, que têm como papel, moldar a função escolhida a fim de fazê-la gerar resultados que levam a valores satisfatórios. É conveniente a aplicação deste método para o estado fundamental  $E_0$ , pois ele é o estado de menor energia, sendo assim os resultados obtidos com o Método Variacional serão sempre maiores que os valores reais encontrados experimentalmente e, na melhor das hipóteses, serão iguais quando a função escolhida como tentativa for a própria função de onda associada ao elétron.

#### 2.1.1 Fundamentos do Método

O Método Variacional ou Método de Variação como também é chamado, tem uma importância relevante na soluções de problemas da Mecânica Quântica relacionados ao estado fundamental que não possui variáveis separáveis. Para se verificar os fundamentos deste método, será utilizado o formalismo matemático de Dirac (WALDEMAR, 2002). Considere que a integral 2.1 determina o limite superior para a energia  $E_0$  do estado fundamental, para um sistema que não possui variáveis separáveis.

$$E = \int \varphi^* H \varphi d^3 r = \langle \varphi | H | \varphi \rangle \quad (2.1)$$

Em que  $H$  é o Hamiltoniano do sistema e que  $\varphi$  seja uma função de onda normalizada e com um comportamento esperado. Considerando que  $\varphi$  seja igual a função real do problema  $\varphi_0$ , que corresponde ao estado fundamental de menor energia  $E_0$ , sendo assim pode-se escrever a seguinte expressão:



$$E = \int \varphi^* H \varphi d^3 r = E_0. \quad (2.2)$$

Caso  $\varphi$  não seja igual a  $\varphi_0$ , deve-se expandir  $\varphi$  em  $n$  conjuntos de funções ortogonais como segue abaixo:

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^n a_n |\varphi_n\rangle \quad (2.3)$$

em que  $a_n$  é a constante de normalização. Multiplicando ambos os membros da expressão 2.3 pelo complexo conjugado da função  $\varphi$  obtém-se

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \sum_{n=0}^n a_n^* a_n \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1, \quad (2.4)$$

portanto

$$\sum_{n=0}^n a_n^* a_n = 1. \quad (2.5)$$

Voltando à equação 2.1 e substitui-se a relação 2.5 de modo que se possa escrever a expressão:

$$E = \sum_{n=0}^n \sum_{n'=0}^{n'} a_n^* a_{n'} \langle \varphi_n | H | \varphi_{n'} \rangle \quad (2.6)$$

em que  $a_n^*$  é a constante de normalização complexada de  $\langle \varphi_n |$  e  $a_{n'}$  é a constante de normalização não complexada de  $|\varphi_{n'}\rangle$ . Como é conhecido que na Mecânica Quântica pode-se escrever  $\langle \varphi_n | H | \varphi_{n'} \rangle$  por  $E \langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle$  e  $a_n^* a_{n'}$  por  $|a_n|^2$ , mas desde que a função  $\varphi_n$  satisfaça a equação de auto valor  $H|\varphi_n\rangle = E|\varphi_n\rangle$ , sendo assim pode-se escrever a expressão 2.6 da seguinte forma:

$$E = \sum_{n=0}^n |a_n|^2 E_n \quad (2.7)$$

Subtraindo ambos os membros da equação 2.8 pela energia do nível mais baixo  $E_0$ , obtém-se

$$E - E_0 = \sum_{n=0}^n |a_n|^2 E_n - E_0. \quad (2.8)$$

Como  $E_n$  é sempre maior ou no mínimo igual a  $E_0$  para todos os valores de  $n$  e que  $|a_n|^2$  é sempre uma quantidade positiva ou nula, o membro direito da equação 2.8 também será sempre positivo ou nulo. Sendo assim observa-se que

$$E \geq E_0. \quad (2.9)$$

Conclui-se então que as energias  $E_1, E_2, E_3, \dots$  correspondente a um certo número de funções de variação  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$  serão sempre maiores que a energia  $E_0$ , ou na melhor das hipóteses igual, e isto constitui a base do Método Variacional relacionado aos níveis de energia do estado fundamental. Então quando se determinar os valores das energias  $E_1, E_2, E_3, \dots$ , o mais baixo valor encontrado será o que mais se aproxima da energia do estado fundamental  $E_0$ .

Freqüentemente as funções  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$  etc, se diferenciam apenas por valores de alguns parâmetros, de modo que pode-se aplicar um processo de minimização para determinar o menor valor de  $E$  que a função tentativa possa produzir.

### 2.1.2 Aplicação e Consistência do Método Variacional

Para verificar como funciona o método variacional, considere um ponto quântico em forma de um disco bidimensional de raio  $R$ , com potencial de confinamento infinito, que possui uma impureza doadora hidrogenóide localizada em seu centro. Os estados de energia possíveis para um elétron ligado à impureza são obtidos a partir da solução da equação de Schroedinger na forma adimensional abaixo.

$$\left(-\nabla^2 - \frac{2}{r}\right) \psi = E \psi \quad (2.10)$$

A solução deste problema fornece para o estado fundamental ( $m = 0$ ) a energia  $E_0 = -4,0R_y^*$  e uma função de onda dada por

$$\psi = A e^{-2r} M\left(\frac{1}{2} - \lambda, 1; \frac{2r}{\lambda}\right), \quad (2.11)$$

em que  $M\left(\frac{1}{2} - \lambda, 1; \frac{2r}{\lambda}\right)$  é uma função Hipergeométrica Confluente e  $\lambda$  é um parâmetro determinado pela condição  $M\left(\frac{1}{2} - \lambda, 1; \frac{2R}{\lambda}\right) = 0$ . Agora suponha que não se sabe a solução e que por sorte é escolhida uma função de onda tentativa do tipo:

$$\psi = A e^{-\alpha r} M\left(\frac{1}{2} - \lambda, 1; \frac{2r}{\lambda}\right). \quad (2.12)$$

Esta função será chamada de Função 1,  $\alpha$  é o parâmetro variacional, que pode ser determinado minimizando a expressão da energia, isto é, derivando a expressão da energia e fazendo-a

igual a zero. A Figura 2.1 mostra que o parâmetro  $\alpha$  que minimiza a energia é 2 e corresponde a uma energia  $E_0 = -4,0R_y^*$ .

Como a função de onda tentativa foi a função de onda exata, o Método Variacional forneceu a energia correta e a correspondente função de onda. Como na prática não se sabe a forma da função de onda, seria muito difícil a escolha da Função 1 como função tentativa. Vamos então escolher duas outras funções para realizar uma comparação. Serão escolhidas como Função 2 e Função 3, as seguintes funções:

$$\psi_2 = Ae^{-\alpha r} J_0(\lambda r), \quad (2.13)$$

$$\psi_3 = Ae^{-\alpha r^2} J_0(\lambda r). \quad (2.14)$$

O comportamento para as energias em função do parâmetro variacional pode ser observado no gráfico a seguir. A Figura 2.1 mostra que o parâmetro  $\alpha$  que minimiza a energia para a Função 2

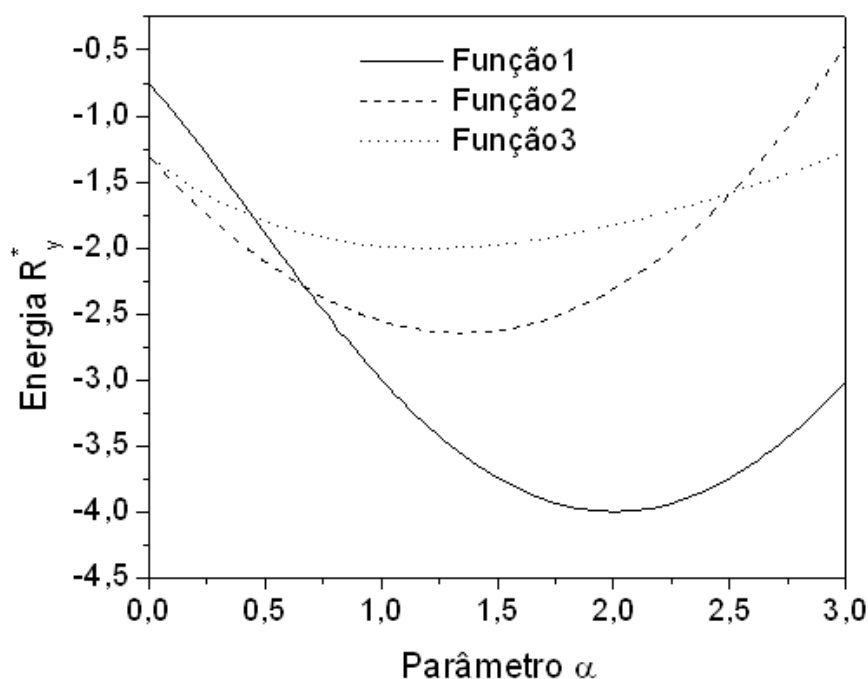


Figura 2.1: Variação da energia em função do parâmetro variacional  $\alpha$ , para as funções 1, 2 e 3.

é  $\alpha = 1,4$ , correspondendo a uma energia  $E_0 = -2,64R_y^*$ . Para a Função 3 a Figura 2.1 mostra o valor de  $\alpha = 1,2$ , o que corresponde a uma energia  $E_0 = -2,0R_y^*$ . Observa-se que os resultados da energia fornecidas pelas Funções 2 e 3 são maiores que o resultado correto,  $-4,0R_y^*$ . O pior resultado foi o obtido com a Função 3.

### 2.1.3 Comportamento da Função de Onda

Pode-se observar os comportamentos das funções de ondas pelo seguinte gráfico:

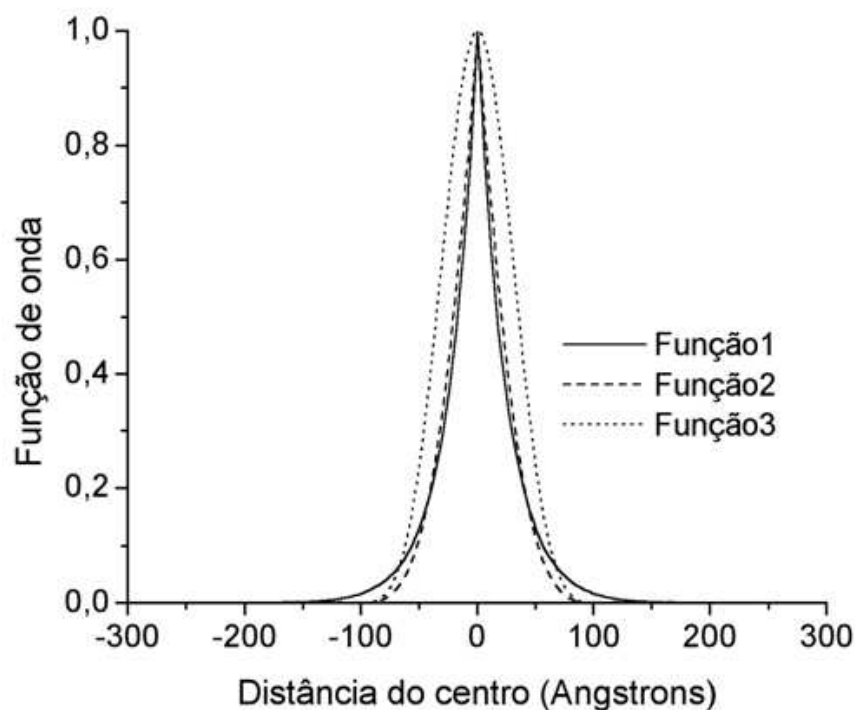


Figura 2.2: Funções de ondas correspondentes às funções 1, 2 e 3.

Deve-se observar que a Figura 2.2 mostra as funções de onda correspondentes às Funções 1, 2 e 3. A Função 1 é a função de onda real do problema. Pode-se observar que a Função 2 se mostrou mais próxima da função real que a Função 3, e por isso o resultado da energia do estado fundamental se fez melhor para Função 2 que para a Função 3. Verifica-se, portanto, que quanto mais próxima da função de onda real for a função tentativa, melhores serão os resultados obtidos para a energia.

### 2.1.4 Escolha da função tentativa

Para que uma função de onda escolhida como tentativa seja bem sucedida, deve-se analisar a geometria do problema, pois para cada tipo de coordenadas tem sempre uma função de onda que se comporta melhor. Mas o que toda função de onda deve ter em comum é: tender a zero no limite esperado ou seja, ser finita, e sempre contínua. As vezes não é uma tarefa fácil escolher uma função de onda que forneça resultados satisfatórios, daí então à necessidade de se escolher várias funções, comparando os resultados obtidos por cada uma, fazendo sempre a escolha da que fornecer o menor valor para a energia.

### 3 *Densidade de Estados em Poços Quânticos*

#### 3.1 Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Infinito

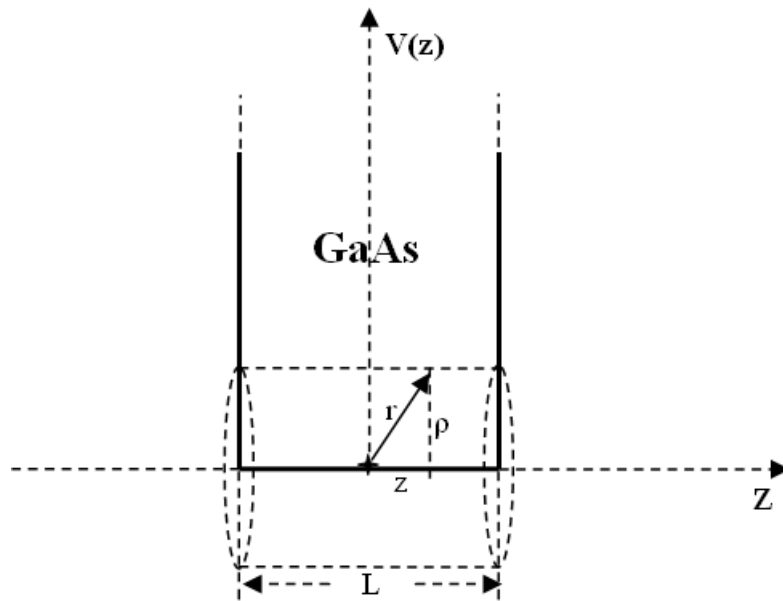


Figura 3.1: Representação de um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito.

Para o elétron ligado a uma impureza localizada em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito como mostra a Figura 3.1, suas energias potenciais e cinética podem ser escritas por meio da seguinte Hamiltoniana:

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.1)$$

em que  $z_i$  é a posição inicial da impureza,  $m^*$  é a massa efetiva do elétron,  $e$  é a carga do elétron,  $\epsilon$  é a constante dielétrica estática do meio e  $P$  corresponde ao momento linear do elétron que esta

associado ao operador Laplaciano pela seguinte relação  $(i\hbar)^2 \nabla^2$ . Como a barreira de potencial é considerada infinita a região de probabilidade de se encontrar o elétron se limita a parte interna do poço, onde o potencial de confinamento  $V(z)$  é igual a zero, pois o elétron não consegue atravessar a barreira de potencial. Para se determinar a energia do elétron pode-se escrever a Hamiltoniana do sistema na forma adimensional, para isto divide-se a Hamiltoniana pelo Rydberg efetivo (EISBERG; RESNICK, 1979), que é dado por  $R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^*a_0^{*2}}$ , onde  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$  e  $a_0^*$  é o raio de Bohr efetivo, dado por  $a_0^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{m^*e^2}$  (EISBERG; RESNICK, 1979). Feito as devidas substituições e dividindo a equação 3.1 pelo Rydberg efetivo obtém-se o seguinte operador Hamiltoniano:

$$\frac{H}{R_y^*} = -\nabla^2 - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.2)$$

Para simplificar a notação será substituído  $\frac{H}{R_y^*}$  por  $H$ , no entanto para se determinar a energia do elétron ligado a uma impureza localizada em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, deve-se resolver a seguinte equação de Schroedinger  $H\psi = E\psi$ , onde o operador Hamiltoniano é dado em coordenadas cilíndricas devido a geometria do problema como mostra abaixo.

$$-\left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z} \right] \psi - \frac{2\psi}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} = E\psi \quad (3.3)$$

em que  $\psi$  corresponde à função de onda associada ao elétron,  $E$  a energia do elétron dentro do poço com alturas de barreiras de potencial infinito. Devido a expressão 3.3 não ter as variáveis  $\rho$  e  $z$  separáveis não pode ser resolvida analiticamente, por isto será aplicado o Método Variacional mencionado no Capítulo 1 (WALDEMAR, 2002), no entanto para este problema será aplicado convenientemente duas função de ondas simples: uma com forma Gaussiana escolhida como primeira função de onda e uma outra com forma Hidrogenóide que será a segunda função de onda escolhida como tentativa. Para ambas as funções de ondas, será utilizada uma função cosseno, pois para o estado fundamental deve-se comportar melhor, uma vez que é solução para o poço de potencial infinito sem a presença de impureza (EISBERG; RESNICK, 1979).

### 3.1.1 Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa

$$\psi(\rho, \theta, z) = Ae^{-\beta\rho^2} e^{im\theta} \cos(kz), \quad (3.4)$$

em que  $A$  é a constante de normalização que deve ser determinada, e  $k = \frac{n\pi}{L}$ , sendo  $L$  a largura do

poço de potencial. Para se determinar a constante de normalização, deve-se calcular a integral do produto da função de onda pelo seu conjugado de forma que a integração em todo seu volume se torne igual a 1, uma vez que probabilidade de se encontrar o elétron dentro do poço é de 100%. Para este caso será considerado a geometria do problema em coordenadas cilíndricas e para facilitar a notação  $\psi(\rho, \theta, z)$  será substituída apenas por  $\psi$ , assim a integral pode ser escrita da seguinte forma.

$$\int_v \psi^* \psi \rho d\rho d\theta dz = 1. \quad (3.5)$$

Como os cálculos das energias para o elétron corresponde ao estado fundamental deve-se fazer  $m = 0$ , sendo assim substituindo a função de onda e o conjugado da função na expressão 3.5 obtém-se após algumas simplificações a seguinte integral.

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(kz) \rho d\rho d\theta dz = 1, \quad (3.6)$$

A expressão 3.6 será integrado primeiramente em  $\rho$  e em  $\theta$ , sendo assim após substituir os limites de zero a infinito para variável  $\rho$  e de zero a  $2\pi$  para variável  $\theta$ , pode-se escrever a seguinte expressão

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{A^2\pi}{2\beta} \cos^2(kz) dz = 1. \quad (3.7)$$

Para resolver a integral em  $z$ , e finalmente encontrar a constante de normalização  $A$ , deve-se aplicar uma propriedade trigonométrica (FLEMMING; GONÇALVES, 1992) em que a integral passará a ser escrita da seguinte forma:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{A^2\pi}{4\beta} [1 + \cos(2kz)] dz = 1. \quad (3.8)$$

Realizando a integração em  $z$  e substituindo os limites da integral, se obtém finalmente uma expressão para a constante de normalização, como se segue abaixo:

$$A^2 = \frac{4\beta}{\pi L}. \quad (3.9)$$

Como foi determinado a constante de normalização  $A$ , pode-se obter as energias do elétron dentro do poço com barreiras de potencial infinito, para isto será aplicado o operador Hamiltoniano na primeira função de onda escolhida como tentativa, de forma que se possa escrever a

seguinte expressão:

$$H\psi = - \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 z} \right] - \frac{2\psi}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.10)$$

Sabe-se que a função de onda  $\psi$  é uma função de  $\rho$ ,  $\theta$  e  $z$ , sendo assim  $\psi$  pode ser escrita como sendo o produto de três funções  $F(\rho)\Theta(\theta)Z(z)$ , em que, cada uma depende apenas da variável correspondente como se segue a baixo:

$$F(\rho) = e^{-\beta\rho^2};$$

$$\Theta(\theta) = e^{im\theta};$$

$$Z(z) = \cos(kz).$$

Como o cálculo das energias se restringe ao estado fundamental onde  $m = 0$ , o termo da função em  $\theta$  será igual a 1(um). Desta forma deve-se resolver apenas as derivadas parciais para as funções que têm dependência com as variáveis  $\rho$  e  $z$ , de forma que se possa substituir os resultados das derivadas na equação 3.10. Realizando a derivada em  $\rho$ , pode-se escrever a seguinte relação:

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dF}{d\rho} \right) = (-4\beta + 4\beta^2\rho^2) e^{-\beta\rho^2} A \cos(kz) \quad (3.11)$$

A derivada da função de onda em  $z$ , é trivial e pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 z} = -Ak^2 e^{-\beta\rho^2} \cos(kz). \quad (3.12)$$

Após substituir a expressão 3.12 e 3.11 em 3.10, pode-se escrever a seguinte equação:

$$H\psi = (4\beta - 4\beta^2\rho^2 + k^2) \psi - \frac{2\psi}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.13)$$

Para se determinar as energias do elétron ligado a uma impureza em um poço quântico, será resolvido a seguinte expressão abaixo:

$$E = \int_v \psi^* H \psi dv. \quad (3.14)$$

Substituindo a equação 3.13 e o conjugado da função de onda na equação 3.14, obtém-se



uma expressão para a energia em termos da integral em todo o espaço de coordenadas cilíndricas conforme mostra a equação 3.15.

$$E = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(kz) \left[ (4\beta - 4\beta^2\rho^2 + k^2) - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \right] \rho d\rho d\theta dz \quad (3.15)$$

Pode-se escrever a equação 3.15 como sendo a soma de duas equações  $E_0 + E_{coul}$ , uma que forneça a energia Coulombiana e a outra a energia cinética do elétron no estado fundamental.

$$E_0 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(kz) (4\beta - 4\beta^2\rho^2 + k^2) \rho d\rho d\theta dz \quad (3.16)$$

$$E_{coul} = - \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} A^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(kz) \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \rho d\rho d\theta dz \quad (3.17)$$

Será resolvido primeiramente a equação 3.16, correspondente a energia do estado fundamental do elétron dentro do poço com barreiras de potencial infinito. Para isto será feito o uso da propriedade trigonométrica citada na equação 3.8, sendo assim, após usar esta propriedade na equação 3.16 e resolver a integral em  $z$  têm-se a seguinte expressão:

$$E_0 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{L}{2} A^2 e^{-2\beta\rho^2} (4\beta - 4\beta^2\rho^2 + k^2) d\theta \rho d\rho. \quad (3.18)$$

A solução da integral em  $\theta$  é dada pelo próprio limite superior de integração. Sendo assim, ao substituir a constante de normalização  $A$  e resolver a integral em  $\rho$  chega-se a seguinte expressão:

$$E_0 = 2\beta + k^2 \quad (3.19)$$

Da mesma forma que a equação anterior a equação 3.17 não depende da variável  $\theta$ , assim a solução da integral em  $\theta$  é dada por  $2\pi$ , de forma que a expressão pode ser escrita por:

$$E_{coul} = - \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{\infty} 4\pi A^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(kz) \frac{\rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.20)$$

A solução da integral em  $\rho$  pode ser obtida em uma tabela de integrais (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), de forma que sua solução pode ser dada por:

$$E_{coul} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} -\frac{8\beta}{L} \sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} \cos^2(kz) e^{2\beta(z-z_i)^2} [1 - \Phi(x)] dz, \quad (3.21)$$

em que  $\Phi(x)$  corresponde a uma função erro que pode ser dada pela integral 3.22 (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), onde  $x = \sqrt{2\beta}(z - z_i)$ .

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (3.22)$$

A integral 3.22 pode ter a solução aproximada por um algoritmo (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968) que será substituído posteriormente para determinar os valores das energia numericamente, sendo assim a expressão para a energia do elétron confinado em um poço de potencial de barreiras infinitas pode ser dada por,

$$E = 2\beta + k^2 - \frac{8}{L} \sqrt{\frac{\pi\beta}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2(kz) e^{2\beta(z-z_i)^2} [1 - \Phi(x)] dz. \quad (3.23)$$

Após obter numericamente o valor da energia por meio da expressão 3.23 deve-se determinar as densidades de estados de impureza  $g_L(E_{lig})$ , no poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, para isto considera-se os centros de impurezas como localizados próximos uns aos outros, então  $g_L(E_{lig})$  resume-se na soma de funções delta em posições definidas, ou seja, deixa-se a posição das impurezas variarem continuamente ao longo do eixo  $z$ , que é a direção de crescimento do poço e com isto deve-se verificar como se distribuem as energias de impurezas doadoras nas estruturas de poços quânticos com barreiras de potencial infinito. A expressão para o cálculo da densidade de estado é dado por:

$$g_L(E_{lig}) = \frac{2}{L} \frac{1}{\left| \frac{dE_{lig}}{dz_i} \right|} \quad (3.24)$$

em que  $E_{Lig}$  corresponde à energia de ligação do elétron à impureza. O resultado da derivada da energia de ligação em relação a posição da impureza, pode ser determinado numericamente através da expressão  $\frac{(E_{lig+\Delta E}) - E_{lig}}{\Delta E}$ , em que  $\Delta E$  corresponde a um pequeno acréscimo na energia de ligação, promovido por uma variação  $\Delta z_i$  na posição da impureza, com isto pode-se determinar as densidades de estados de impurezas para o poço de potencial infinito.

## 3.2 Segunda Função de Onda Escolhida Como Tentativa

Ainda para o poço infinito será escolhida uma segunda função de onda para comparar com os resultados obtidos pela Função I. Para isto será feito o uso de uma função Hidrogenóide como foi citado no início deste capítulo.

$$\psi_{II} = D e^{-\beta\rho} e^{im\theta} \cos(kz) \quad (3.25)$$

Utilizando os mesmos passos realizados anteriormente para normalizar a primeira função, pode-se normalizar a função 3.25. Sendo assim a constante de normalização  $D$  pode ser escrita da seguinte forma:

$$D^2 = \frac{4\beta^2}{\pi L}. \quad (3.26)$$

Para se obter uma expressão para energia deve-se aplicar o operador Hamiltoniano em coordenadas cilíndricas na função 3.72, de modo que se possa escrever a seguinte relação:

$$H\psi_{II} = \left( \frac{\beta}{\rho} - \beta^2 + k^2 \right) \psi_{II} - \frac{2\psi_{II}}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \quad (3.27)$$

Será multiplicado o conjugado da função de onda pela expressão 3.27, e em seguida deve-se integrar em todo o espaço de coordenadas cilíndricas para que se possa obter uma expressão para energia. Feito as devidas substituições na integral têm-se a seguinte expressão:

$$E = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \left( \frac{\beta}{\rho} - \beta^2 + k^2 \right) D^2 e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz) \rho d\rho d\theta dz \quad (3.28)$$

$$- \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2D^2 e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz)}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho d\theta dz.$$

Pode-se escrever a expressão 3.30 como sendo a soma de outras duas, dadas por  $E_0$  e  $E_{Coul}$  como se segue abaixo:

$$E_0 = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \left( \frac{\beta}{\rho} - \beta^2 + k^2 \right) D^2 e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz) \rho d\rho d\theta dz \quad (3.29)$$

$$E_{Coul} = - \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2D^2 e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz)}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho d\theta dz. \quad (3.30)$$

Após realizar a integral 3.29 obtém-se uma equação, a qual pode ser escrita por

$$E_0 = \beta^2 + k^2. \quad (3.31)$$

Sendo assim a expressão para a energia do elétron ligado a uma impureza dentro do poço com barreiras de potencial infinito referente a segunda função de onda escolhida como tentativa, será dada por:

$$E = \beta^2 + k^2 - \frac{16\beta^2}{L} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz)}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz. \quad (3.32)$$

Para um elétron confinado em um poço quântico com alturas de barreiras de potencial infinito, pode-se obter os valores das energias por meio da equação 3.32, para isto deve-se minimizar a equação em termos do parâmetro variacional, de forma que se possa obter os valores das energias numericamente. Após determinar os valores das energias deve-se obter a densidade de estado de impureza assim como foi feito para a primeira função tentativa anteriormente.

### 3.3 Poço Quântico Com Alturas de Barreiras de Potencial Finito.

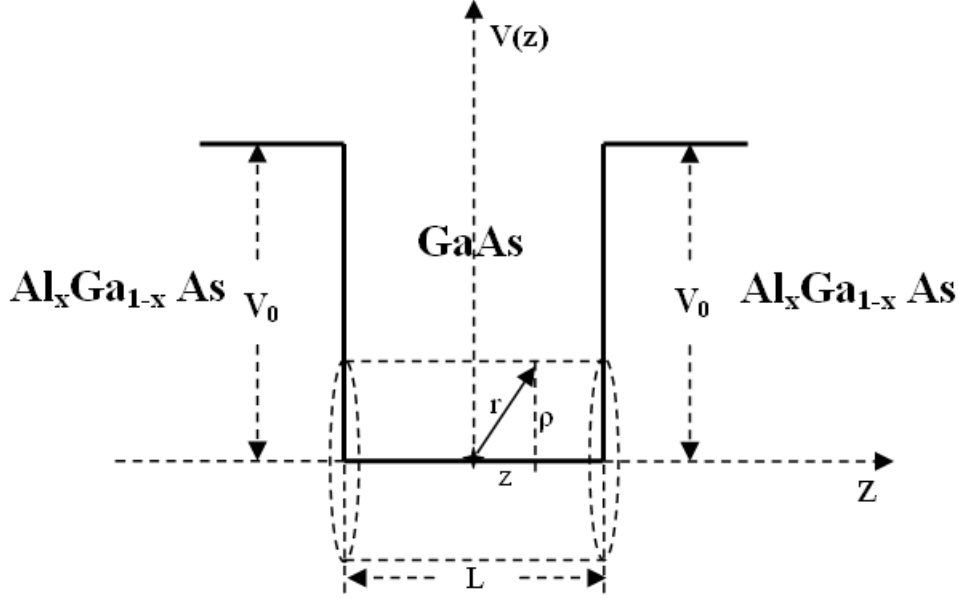


Figura 3.2: Poço quântico finito em coordenadas cilíndricas, com o elétron ligado a impureza

Para o elétron ligado a uma impureza em poço quântico com alturas de barreiras de potencial finito Figura 3.2, suas energias potenciais e cinética são representadas pela Hamiltoniana da equação 3.33.

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(z) - \frac{e^2}{\epsilon [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.33)$$

Para as regiões fora do poço, as quais serão chamadas de *I* e *III* o potencial  $V(z)$  de confinamento deve ser constante e igual a  $V_0$ , e dentro do poço, na qual será chamada de região *II*, o potencial  $V(z)$  se torna igual à zero. Como o elétron pode penetrar na região de  $Al_xGa_{1-x}As$ , ele têm sua massa efetiva alterada, sendo assim a massa efetiva do elétron dentro e fora do poço, serão chamadas respectivamente por  $m_1^*$  e  $m_2^*$ , com isto pode-se escrever a Hamiltoniana por:

$$H = \frac{p^2}{2m_1^*} + V_0 - \frac{e^2}{\epsilon [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad \left( z < -\frac{L}{2} \text{ e } z > \frac{L}{2} \right) \quad (3.34)$$

$$H = \frac{p^2}{2m_2^*} - \frac{e^2}{\epsilon [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad \left( -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \right). \quad (3.35)$$

Deve-se escrever primeiramente a Hamiltoniana na forma adimensional, para isto dividi-se

toda expressão pelo Rydberg efetivo (EISBERG; RESNICK, 1979), como foi citado anteriormente para o poço de potencial infinito. A relação  $m_2^*/m_1^*$  será chamada de  $\delta$ , assim após simplificar alguns termos obtém-se a seguinte expressão.

$$H = -\delta\nabla^2 - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} + V_0, \quad \left( z < -\frac{L}{2} \text{ e } z > \frac{L}{2} \right) \quad (3.36)$$

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad \left( -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \right) \quad (3.37)$$

### 3.3.1 Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa

Para o poço com barreiras de potencial finito, assim como foi feito para o poço infinito deve-se aplicar o Método Variacional, sendo assim serão escolhidas duas funções, uma com forma Gaussiana e a outra com forma Hidrogenóide. Para as funções de ondas escolhidas como tentativas devem-se considerar as três regiões, uma vez que se está calculando as energias para o poço finito existe uma probabilidade do elétron penetrar na barreira de potencial, assim a primeira função de onda escolhida para as três regiões *I*, *II* e *III* pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi_I = C e^{-\beta\rho^2} e^{im\theta} e^{k_2 z} \quad (3.38)$$

$$\psi_{II} = B e^{-\beta\rho^2} e^{im\theta} \cos(k_1 z) \quad (3.39)$$

$$\psi_{III} = C e^{-\beta\rho^2} e^{im\theta} e^{-k_2 z} \quad (3.40)$$

em que  $B$  e  $C$  são constantes de normalizações, sendo  $C = B \cos\left(\frac{k_1 L}{2}\right) e^{\frac{k_2 L}{2}}$  (EISBERG; RESNICK, 1979) e que  $K_2$  e  $K_1$  estão relacionados pela seguinte equação transcendental

$$\frac{m_1}{m_2} k_2 = k_1 \tan \frac{k_1 L}{2},$$

demonstrada no Apêndice A.

Por se estar calculando as energias para o estado fundamental deve-se fazer  $m = 0$ , mas antes de se determinar as energias será obtida a constante de normalização  $B$ , pela seguinte integral:

$$\int_v \psi^* \psi dv = 1. \quad (3.41)$$

Para resolver a integral 3.41, deve-se separá-la em três integrais em suas respectivas regiões de integração conforme mostra abaixo:

$$\int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} C^2 e^{-2\beta\rho^2} e^{2k_2z} \rho d\rho d\theta dz \quad (3.42)$$

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} B^2 e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(k_1z) \rho d\rho d\theta dz \quad (3.43)$$

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} C^2 e^{-2\beta\rho^2} e^{-2k_2z} \rho d\rho d\theta dz \quad (3.44)$$

A soma das integrais 3.42, 3.43 e 3.44 deve ser igual a 1, uma vez que a probabilidade de encontrar o elétron em uma das três regiões é de 100%. Estas integrais terão soluções em  $\theta$  iguais a  $2\pi$  e em  $\rho$ , a solução é trivial e pode ser expressa como se segue a baixo:

$$\frac{C^2\pi}{2\beta} \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} e^{2k_2z} dz + \frac{B^2\pi}{2\beta} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2(k_1z) dz + \frac{C^2\pi}{2\beta} \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} e^{-2k_2z} dz = 1. \quad (3.45)$$

A integral do cosseno pode ser resolvida como foi feito para o poço infinito, no entanto deve-se tomar o cuidado ao substituir os limites, pois o número de ondas  $k_1$  é diferente da apresentada no poço infinito. Resolvendo as integrais exponenciais e substituindo os limites correspondente a cada região, obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{\pi C^2}{4\beta k_2} e^{-k_2L} + \frac{\pi B^2}{4\beta} \left( L + \frac{\text{sen}(k_1L)}{k_1} \right) + \frac{\pi C^2}{4\beta k_2} e^{-k_2L} = 1.$$

Então, finalmente após substituir a constante  $C$  pela relação dependente de  $B$  e simplificar alguns termos, pode-se escrever uma expressão para a constante de normalização.

$$B^2 = \frac{4\beta k_1 k_2}{\pi \left[ 2k_1 \cos^2\left(\frac{k_1L}{2}\right) + k_1 k_2 L + k_2 \text{sen}(k_1L) \right]} \quad (3.46)$$

Após ter obtido a constante de normalização  $B$ , será calculada as energias do elétron confinado em um poço quântico com alturas de barreiras de potencial finito, para isto deve-se atuar com o operador Hamiltoniano na função de onda como mostra as equações abaixo.

$$H\psi_I = -\delta \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi_I}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial^2 z} \right] - \frac{2\psi_I}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} + V_0 \psi_I \quad (3.47)$$

$$H\psi_{II} = - \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi_{II}}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial^2 z} \right] - \frac{2\psi_{II}}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.48)$$

$$H\psi_{III} = -\delta \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi_{III}}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial^2 \theta} + \frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial^2 z} \right] - \frac{2\psi_{III}}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} + V_0 \psi_{III} \quad (3.49)$$

Para a região *II*, tem-se a expressão 3.48, que pode ser resolvida assim como no poço infinito, portanto obtém-se:

$$H\psi_{II} = \left[ (4\beta - 4\beta^2 \rho^2 + k_1^2) - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \right] B e^{-\beta \rho^2} \cos(k_1 z) \quad (3.50)$$

Será aplicado o operador Hamiltoniano na equação 3.47, mas antes deve-se escrever a função  $\psi(\rho, \theta, z)$  como sendo o produto de três funções  $F(\rho)\Theta(\theta)Z(z)$ , em que

$$F(\rho) = e^{-\beta \rho^2};$$

$$\Theta(\theta) = e^{im\theta};$$

$$Z(z) = e^{-k_2 z}.$$

Fazendo  $m = 0$ , em seguida aplicando o operador Hamiltoniano na função de onda, obtém-se para região *I*.

$$H\psi_I = \left[ \delta (4\beta - 4\beta^2 \rho^2 - k_2^2) - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} + V_0 \right] C e^{-\beta \rho^2} e^{k_2 z} \quad (3.51)$$

A aplicação do operador Hamiltoniano na função de onda para região *III* é análoga a da região *I*, sendo assim pode-se escrever a seguinte expressão para região *III*:

$$H\psi_{III} = \left[ \delta (4\beta - 4\beta^2 \rho^2 - k_2^2) - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} + V_0 \right] C e^{-\beta \rho^2} e^{-k_2 z} \quad (3.52)$$

Para se determinar a energia do elétron dentro do poço com alturas de barreiras de potencial finito, deve-se fazer uso da seguinte expressão:

$$E = \int_v \psi^* H \psi dv \quad (3.53)$$

Ao substituir os limites da integral em  $z$ , deve-se observar as funções de ondas para cada região de integração, sendo assim a energia média total pode ser dada pela soma das energias



das três regiões, conforme mostra a seguinte relação:

$$E = E_I + E_{II} + E_{III} \quad (3.54)$$

Será calculado primeiramente a energia para região  $I$  correspondente a  $E_I$ , sendo assim substituindo as integrais e seus devidos limites, juntamente com o conjugado da função de onda da região  $I$  e a equação 3.51, pode-se escrever a seguinte expressão:

$$E_I = \int_{-\infty}^{-\frac{l}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} [\delta(4\beta - 4\beta^2\rho^2 - k_2^2) + V_0] C^2 e^{-2\beta\rho^2} e^{2k_2z} \rho d\rho d\theta dz \quad (3.55)$$

$$- \int_{-\infty}^{-\frac{l}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{2C^2 e^{-2\beta\rho^2} e^{2k_2z}}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{\frac{1}{2}}} \rho d\rho d\theta dz.$$

Observando a expressão 3.55 nota-se que a mesma pode ser dividida em duas integrais, a primeira correspondente à energia cinética mais a energia potencial da barreira  $E'_I$  e a segunda correspondente à energia Coulombiana  $E_{ICoul}$ . Será determinada primeiramente  $E'_I$ , na qual pode-se observar que não têm dependência em  $\theta$ , sendo assim têm-se a seguinte expressão

$$E'_I = 2\pi C^2 \int_{-\infty}^{-\frac{l}{2}} \left[ \int_0^{\infty} [\delta(4\beta - k_2^2) + V_0] \rho e^{-2\beta\rho^2} d\rho - \int_0^{\infty} 4\delta\beta^2 \rho^2 \rho e^{-2\beta\rho^2} d\rho \right] e^{2k_2z} dz. \quad (3.56)$$

A primeira parte da integral em  $\rho$  da equação 3.56 têm solução trivial e pode ser expressa por:

$$\int_0^{\infty} [\delta(4\beta - k_2^2) + V_0] \rho e^{-2\beta\rho^2} d\rho = \frac{\delta(4\beta - k_2^2) + V_0}{4\beta} \quad (3.57)$$

A segunda parte da integral em  $\rho$  da equação 3.56 é semelhante a que foi resolvida para o poço infinito onde a solução é dada da seguinte forma:

$$- \int_0^{\infty} 4\delta\beta^2 \rho^2 \rho e^{-2\beta\rho^2} d\rho = -\frac{\delta}{2}. \quad (3.58)$$

Substituindo as equações 3.58 e 3.57 em 3.56, e em seguida calculando a integral da equação 3.56 em  $z$ , obtém-se a seguinte expressão.

$$E'_I = \frac{\pi C^2 e^{-Lk_2}}{k_2} \left( \frac{\delta(2\beta - k_2^2) + V_0}{4\beta} \right) \quad (3.59)$$

Para a parte Coulombiana será resolvida a integral analiticamente apenas em  $\theta$ , pois a

solução em  $\rho$  e  $z$  não é exata como foi visto anteriormente para o poço infinito dada pela função erro  $\Phi(x)$  (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), sendo assim os cálculos serão feitos numericamente. Em fim, substituindo a constante  $C$ , pode-se escrever uma expressão para a energia referente a região  $I$  como sendo a soma das expressões  $E_I'$  e  $E_I Coul.$

$$E_I = \pi B^2 \frac{\cos^2\left(\frac{k_1 L}{2}\right)}{k_2} \left[ \frac{\delta(2\beta - k_2^2) + V_0}{4\beta} \right] - 4\pi B^2 \cos^2\left(\frac{k_1 L}{2}\right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{-L/2} \frac{e^{-2\beta\rho^2} e^{2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \quad (3.60)$$

A expressão para a energia referente a região  $II$ , pode ser escrita da seguinte forma:

$$E_{II} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \left[ (4\beta - 4\beta^2 \rho^2 + k_1^2) - \frac{2}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \right] B^2 \cos^2(k_1 z) e^{2\beta\rho^2} \rho d\rho d\theta dz \quad (3.61)$$

A solução para a integral 3.61 em  $\rho$  é semelhante a que foi resolvida para região  $I$  e tem solução trivial para o cosseno. Mantendo a parte Coulombiana para ser resolvida numericamente podemos escrever a seguinte expressão:

$$E_{II} = (2\beta + k_1^2) \frac{\pi B^2}{4\beta} \left( L + \frac{\text{sen}(k_1 L)}{k_1} \right) - 4\pi B^2 \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-2\beta\rho^2} \cos^2(k_1 z) \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \quad (3.62)$$

Como a parte referente à região  $III$  é semelhante à região  $I$ , diferenciando apenas pelo limite da integral em  $z$  e o sinal da exponencial, pode-se representar a energia  $E_{III}$  por:

$$E_{III} = \pi B^2 \frac{\cos^2}{k_2} \left[ \frac{\delta(2\beta - k_2^2) + V_0}{4\beta} \right] - 4\pi B^2 \cos^2\left(\frac{k_1 L}{2}\right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{L/2}^\infty \frac{e^{-2\beta\rho^2} e^{-2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \quad (3.63)$$

Pode-se então finalmente escrever a expressão final para a energia do elétron num poço com barreiras de potencial finito, como sendo a soma das equações 3.60, 3.62 e 3.63.

$$\begin{aligned}
E = & \frac{\pi B^2}{k_2} \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) \left[ \frac{\delta(2\beta - k_2^2) + V_0}{2\beta} \right] + \frac{\pi B^2}{4\beta} (2\beta + K_1^2) \left( L + \frac{\text{sen}(k_1 L)}{k_1} \right) \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \frac{e^{-2\beta \rho^2} e^{2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{\frac{L}{2}}^\infty \frac{e^{-2\beta \rho^2} e^{-2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \\
& - 4\pi B^2 \int_0^\infty \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{e^{-2\beta \rho^2} \cos^2(k_1 z) \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \tag{3.64}
\end{aligned}$$

### 3.3.2 Segunda Função de Onda Escolhida Como Tentativa

Para melhor comparar os resultados do poço finito, será feito o uso de uma segunda função, assim como foi feito para o poço infinito será aplicada uma função de onda com forma Hidro-genóide conforme mostra abaixo, para as respectivas regiões do poço.

$$\varphi_I = C e^{-\beta \rho} e^{im\theta} e^{k_2 z}; \tag{3.65}$$

$$\varphi_{II} = B e^{-\beta \rho} e^{im\theta} \cos(k_1 z); \tag{3.66}$$

$$\varphi_{III} = C e^{-\beta \rho} e^{im\theta} e^{-k_2 z}. \tag{3.67}$$

Em que as constantes de normalizações  $C$  e  $B$ , se relacionam conforme citado anteriormente na primeira função de onda escolhida para o poço finito. Resolvendo de forma análoga à primeira função do poço finito pode-se escrever a constante de normalização para este caso da seguinte forma:

$$B^2 = \frac{4\beta^2 k_1 k_2}{\pi \left[ 2k_1 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) + k_1 k_2 L + k_2 \text{sen}(k_1 L) \right]} \tag{3.68}$$

Aplicando o mesmo método feito na primeira função de onda escolhida como tentativa para o poço finito afim de se determinar uma expressão para a energia, obtém-se.

$$\begin{aligned}
E = \pi B^2 & \left[ \frac{\beta^2 + k_1^2}{4\beta^2} \left( L + \frac{\text{sen}(k_1 L)}{K_1} \right) + \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) \left( \frac{\delta(\beta^2 - k_2^2) + V_0}{2k_2\beta^2} \right) \right] \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{-L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} e^{2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \\
& - 4\pi B^2 \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} e^{-2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{L/2}^\infty \frac{e^{-2\beta\rho} e^{-2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \quad (3.69)
\end{aligned}$$

Os valores das energias  $E$ , das energias de ligações  $E_{lig}$  e das energias sem impureza  $E_{SI}$  em função da largura do poço, serão determinadas numericamente para as expressões 3.64 e 3.69, após minimizar a energia em relação ao parâmetro variacional.

A densidade de estados de impurezas para o poço de potencial finito será obtida assim como foi feito para o poço infinito, resolvendo a seguinte equação:

$$g_L(E_{lig}) = \frac{2}{L} \frac{1}{\left| \frac{dE_{lig}}{dz_i} \right|} \quad (3.70)$$

Para este caso de barreiras de potencial finito, o potencial de confinamento depende da concentração  $x$  de alumínio na liga de  $Al_xGa_{x-1}$ , por isto serão calculadas as derivadas das energias de ligações em relação à posição da impureza e em seguida a densidade de estado de impureza  $g_L(E_{lig})$ , para várias concentrações de alumínio e para diferentes larguras do poço de potencial.

## 3.4 Resultados

### 3.4.1 Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Infinito.

Com a aplicação do Método Variacional nas funções de ondas

$$\psi_I = A e^{-\beta\rho^2} e^{im\theta} \cos(kz) \quad (3.71)$$

$$\psi_{II} = D e^{-\beta\rho} e^{im\theta} \cos(kz) \quad (3.72)$$

escolhidas como tentativa, foi possível determinar respectivamente duas expressões para energia dadas por:

$$E = 2\beta + k^2 - \frac{8}{L} \sqrt{\frac{\pi\beta}{2}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2(kz) e^{2\beta(z-z_i)^2} [1 - \Phi(x)] dz. \quad (3.73)$$

$$E = \beta^2 + k^2 - \frac{16\beta^2}{L} \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} \cos^2(kz)}{[\rho^2 + (z-z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz. \quad (3.74)$$

Porém para se determinar os valores das energias do elétron dentro do poço  $E$ , das energias de ligação  $E_{lig}$  e para as energias sem impureza  $E_{SI}$  referente ao poço com altura de barreiras de potencial infinito, as expressões 3.73 e 3.74 devem ser resolvidas numericamente.

Para a solução numérica das equações 3.73 e 3.74, o parâmetro variacional  $\beta$  é obtido minimizando a expressão da energia em função do próprio parâmetro e que para algumas constantes foram utilizados os seguintes valores : raio de Bohr efetivo  $a_0^* = 98,69meV$ , Rydberg efetivo  $R_y^* = 5,83meV$  e a massa efetiva do elétron dentro do poço  $m^* = 0,067m_e$ , em que  $m_e$  é a massa do elétron livre dada por  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}kg$ . A função erro escrita na equação 3.20 tem solução aproximada por um algoritmo representado pela expressão a seguir,

$$\Phi(x) = 1 - \left( a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4 + a_5 t^5 \right) e^{-x^2}, \quad (3.75)$$

em que  $x = \sqrt{2\beta}(z - z_i)$  e  $t = \frac{1}{1+px}$ . Os valores para as constantes  $a_1, a_2, a_3, a_4, a_5$ , e  $p$  estão representados na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Constantes.

Constante	valor
$a_1$	0,254829592
$a_2$	-0,284496736
$a_3$	1,421413741
$a_4$	-1,453152027
$a_5$	1,061405429
$p$	0,3275911

Após obter os resultados numéricos da energia  $E$  e da energia sem impureza  $E_{SI}$ , foi possível determinar as energias de ligações  $E_{lig}$  pela relação  $E_{lig} = E - E_{SI}$ , portanto os gráficos para as energias  $E$  e  $E_{lig}$  em função da largura do poço para as duas funções de ondas escolhidas como tentativa estão representadas a seguir.

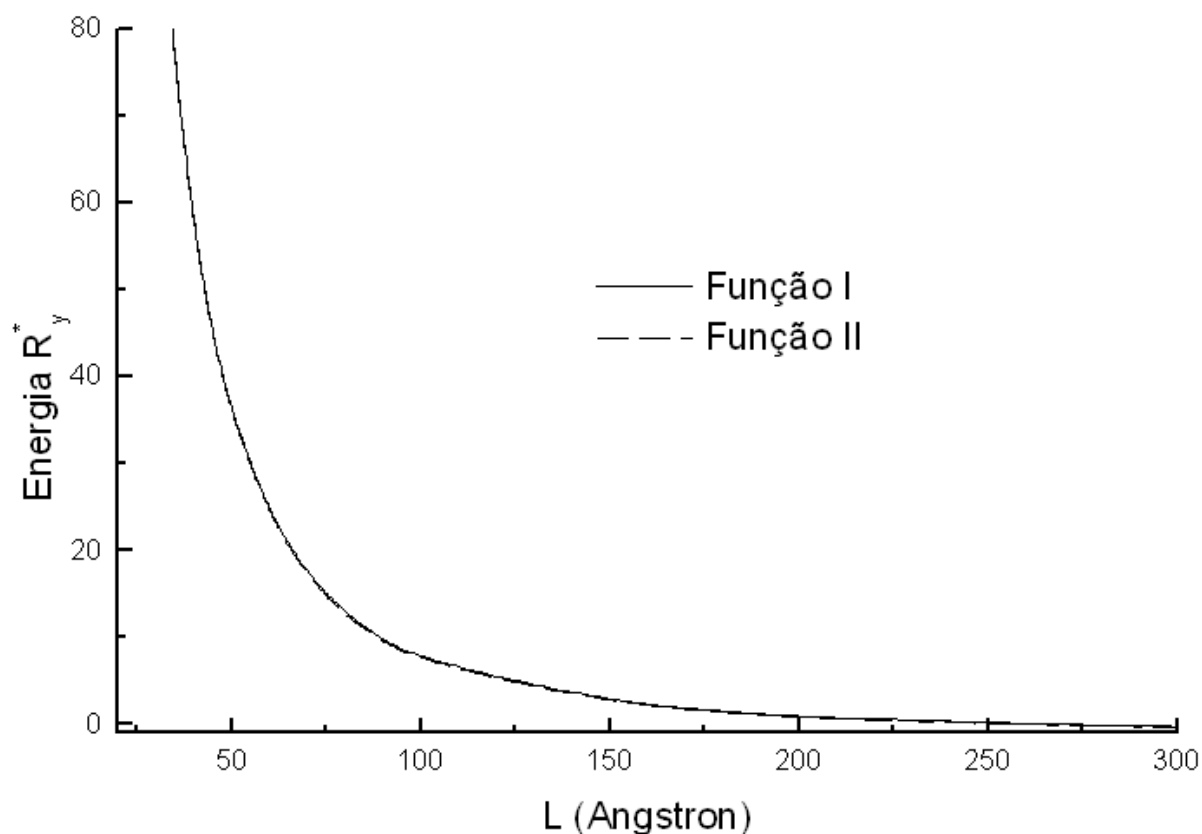


Figura 3.3: Energia em função da largura do poço quântico para a impureza localizada no centro do poço  $z_i = 0$ .

A Figura 3.3 representa as energias do elétron em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, ligado a uma impureza na posição  $z_i = 0$  em função da largura do poço de acordo com as duas funções de ondas escolhidas como tentativa. Pode-se observar que a medida que a largura do poço aumenta tendendo para o infinito o valor da energia deve tender a  $-1,0R_y^*$ , porém devido à forma das funções de ondas escolhidas como tentativa, os resultados para poços com larguras acima de  $600\text{\AA}$  não são tão satisfatório. No entanto quando se diminui a largura do poço fazendo com que tenda a zero a energia do elétron vai para infinito de acordo com o que é esperado, pois a altura da barreira de potencial é infinita e o elétron não consegue escapar do poço. Devido às diferenças dos valores das energias obtidos pelas duas funções de ondas não ficarem visíveis na Figura 3.3 pode-se utilizar as tabelas 3.2 e 3.3 para comparar melhor os resultados.

Tabela 3.2: Energias em função da largura do poço quântico para impureza localizada no centro  $z_i = 0$ , obtidas com a primeira função.

$L(\text{Å})$	$\beta$	$E_{SI}(R_y^*)$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$
1	1,552125	96127,1448	96124,0220	3,122834
5	1,482384	3845,085797	3842,03463	3,051167
10	1,404837	961,271442	958,30306	2,968382
15	1,316391	427,231752	424,33962	2,892132
20	1,274728	240,317866	237,49633	2,821536
25	1,219451	153,803428	151,04755	2,755878
30	1,169365	106,807938	104,11337	2,694568
35	1,123727	78,471139	75,834023	2,637116
40	1,081934	60,079465	57,496356	2,583109
45	1,043491	47,470196	44,937998	2,532198
50	1,007986	38,450858	35,966778	2,484080
60	0,944474	26,701985	24,306765	2,395220
70	0,889229	19,617785	17,302957	2,314828
80	0,840662	15,019866	12,778281	2,241585
90	0,797578	11,867549	9,693094	2,174455
100	0,759058	9,612714	7,500111	2,112603
150	0,614203	4,272318	2,409850	1,862468
200	0,518178	2,403178	0,724688	1,678490
300	0,397403	1,068079	-0,352347	1,420426
400	0,323791	0,600793	-0,643508	1,244301
500	0,273888	0,384508	-0,729891	1,114399
600	0,237688	0,26702	-0,746614	1,013634

Tabela 3.3: Energias em função da largura do poço quântico para impureza localizada no centro  $z_i = 0$  obtidas com a segunda função.

$L(\text{Å})$	$\beta$	$E_{SI}(R_y^*)$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$
1	1,983542	96127,1448	96123,1782	3,966619
5	1,899282	3845,0858	3841,2935	3,792269
10	1,818330	961,27145	957,65203	3,619423
15	1,751299	427,23175	423,75851	3,473168
20	1,693801	240,31786	236,97204	3,345819
25	1,643415	153,80343	150,57045	3,232978
30	1,598582	106,80794	103,67622	3,131721
35	1,558228	78,471138	75,431169	3,039970
40	1,521568	60,079466	57,123287	2,956178
45	1,488013	47,470195	44,591039	2,879156
50	1,457105	38,450858	35,642895	2,807963
60	1,401844	26,701985	24,021807	2,680177
70	1,353616	19,617785	17,049543	2,568242
80	1,310935	15,019866	12,550917	2,468950
90	1,272738	11,867549	9,487581	2,379968
100	1,238235	9,612715	7,313169	2,299546
150	1,104099	4,272317	2,284997	1,987320
200	1,009507	2,403179	0,634542	1,768636
300	0,880299	1,068079	-0,406015	1,474095
400	0,793240	0,600795	-0,678951	1,279746
500	0,729037	0,384509	-0,754781	1,139290
600	0,678976	0,267019	-0,764805	1,031826



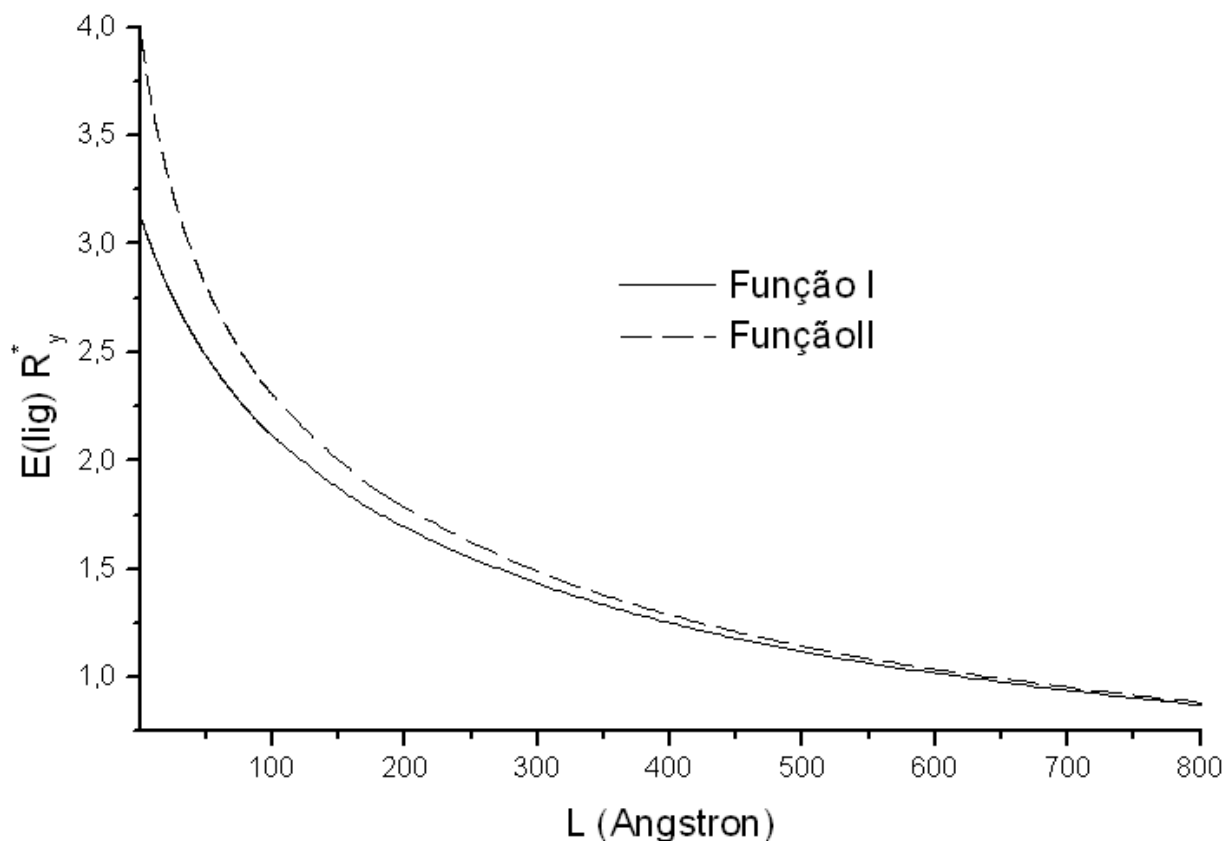


Figura 3.4: Energia de ligação em função da largura do poço quântico para a impureza localizada no centro do poço  $z_i = 0$ .

A Figura 3.4 representa as energias de ligações  $E_{lig}$  para o elétron confinado em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, ligado a uma impureza na posição  $z_i = 0$  em função da largura do poço de acordo com as duas funções de ondas escolhidas como tentativa. Observa-se que para a largura do poço tendendo a infinito a energia de ligação tende a  $1,0R_y^*$  para ambas as funções, no entanto quando a largura do poço é diminuída tendendo a zero, o valor para energia de ligação foi bom apenas para a segunda função de onda escolhida como tentativa, na qual o resultado era de  $4,0R_y^*$  estando de acordo com (BASTARD, 1981).

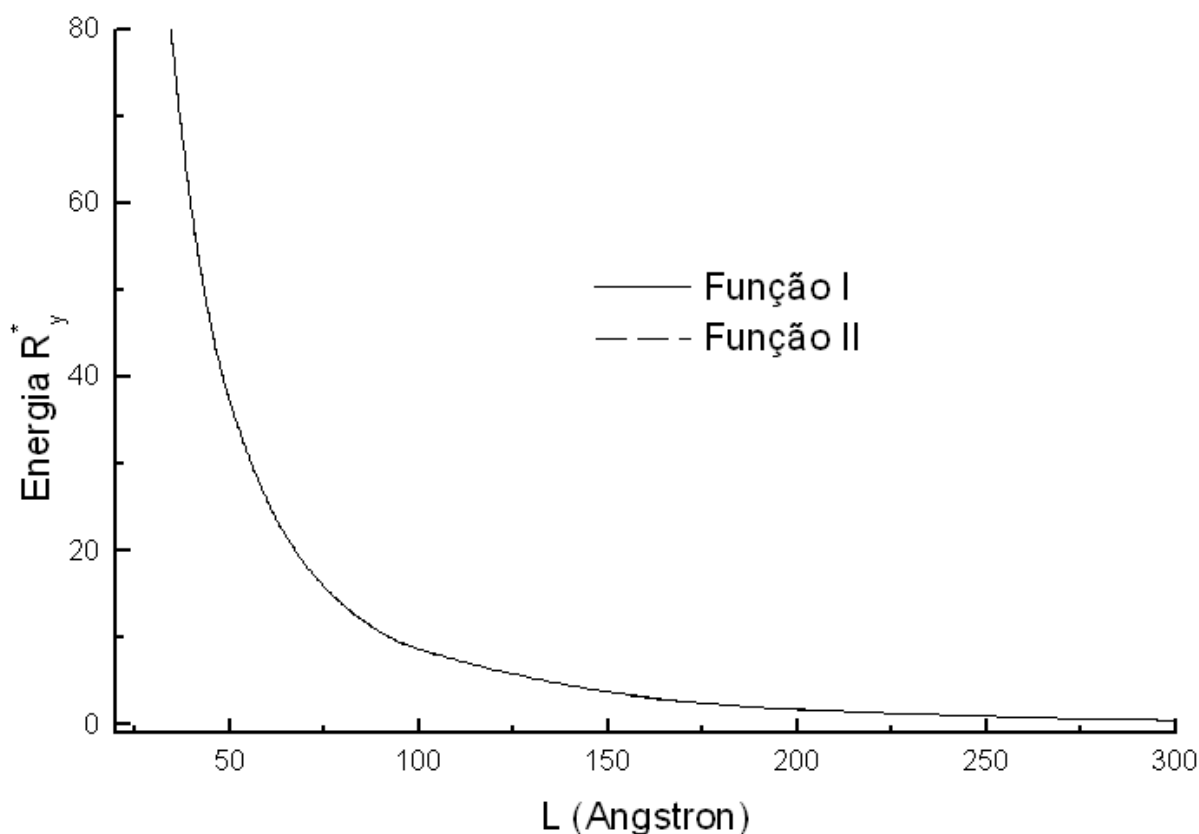


Figura 3.5: Energia em função da largura do poço quântico para a impureza localizada na borda do poço  $z_i = L/2$ .

A Figura 3.5 representa as energias do elétron confinado em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, ligado a uma impureza na borda do poço  $z_i = L/2$  em função da largura do poço de acordo com as duas funções de ondas escolhidas como tentativa. Pode-se observar que a medida que a largura do poço aumenta o valor da energia vai diminuindo até assumir valores negativos, no entanto quando se diminui a largura do poço fazendo com que tenda a zero a energia do elétron vai para infinito, pois devido a altura da barreira de potencial ser infinita o elétron não consegue escapar do poço. Pelas diferenças dos valores das energias obtidas com as duas funções de ondas não terem sido visíveis no gráfico, pode-se utilizar as tabelas 3.4 e 3.5 para comparar melhor os resultados.

Tabela 3.4: Energias em função da largura do poço quântico para a impureza na borda do poço  $z_i = L/2$  obtidas com a primeira função.

$L(\text{Å})$	$\beta$	$E_{SI}(R_y^*)$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$
1	1,509799	96127,1449	96124,0652	3,079726
5	1,309136	3845,0858	3842,22283	2,862964
10	1,125241	961,27145	958,62763	2,643819
15	0,987949	427,231759	424,76686	2,464899
20	0,881079	240,31786	238,00297	2,314894
25	0,795292	153,803429	151,61683	2,186599
30	0,724779	106,807938	104,732791	2,075147
35	0,665719	78,471139	76,494036	1,977103
40	0,615484	60,079465	58,189512	1,889953
45	0,572206	47,470195	45,658386	1,811809
50	0,534515	38,450858	36,709641	1,741217
60	0,472021	26,701984	25,083634	1,618350
70	0,422282	19,617785	18,103124	1,514661
80	0,381737	15,019865	13,594199	1,425666
90	0,348044	11,867549	10,519313	1,348236
100	0,319600	9,612714	8,332614	1,280100
150	0,225256	4,272317	3,240741	1,031576
200	0,172370	2,403178	1,531186	0,871992
300	0,115374	1,068079	0,393168	0,674911
400	0,085450	0,600795	0,045087	0,555708
500	0,067166	0,384509	-0,090315	0,474824
600	0,054914	0,267020	-0,148890	0,415910

Tabela 3.5: Energias em função da largura do poço quântico para a impureza na borda do poço  $z_i = L/2$  obtidas com a segunda função

$L(\text{Å})$	$\beta$	$E_{SI}(R_y^*)$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$
1	1,928198	96127,1449	96123,2914	3,853507
5	1,719472	3845,08579	3841,67657	3,409220
10	1,548786	961,271449	958,239241	3,032208
15	1,426085	427,231755	424,475251	2,756504
20	1,331075	240,317862	237,776425	2,541437
25	1,254125	153,803432	151,436660	2,366771
30	1,189861	106,807939	104,587060	2,220879
35	1,134978	78,471139	76,374686	2,096453
40	1,087293	60,079465	58,090865	1,988601
45	1,045296	47,470195	45,576302	1,893893
50	1,007894	38,450858	36,641024	1,809834
60	0,943822	26,701985	25,035360	1,666625
70	0,890574	19,617785	18,069237	1,548548
80	0,845335	15,019866	13,570823	1,449043
90	0,806235	11,867549	10,503810	1,363739
100	0,771971	9,612714	8,323128	1,289586
150	0,647340	4,272318	3,246750	1,025567
200	0,566718	2,403179	1,542505	0,860674
300	0,465000	1,068079	0,406885	0,661194
400	0,401405	0,600795	0,058355	0,542439
500	0,356879	0,384509	-0,078047	0,462555
600	0,323515	0,267019	-0,137661	0,404689

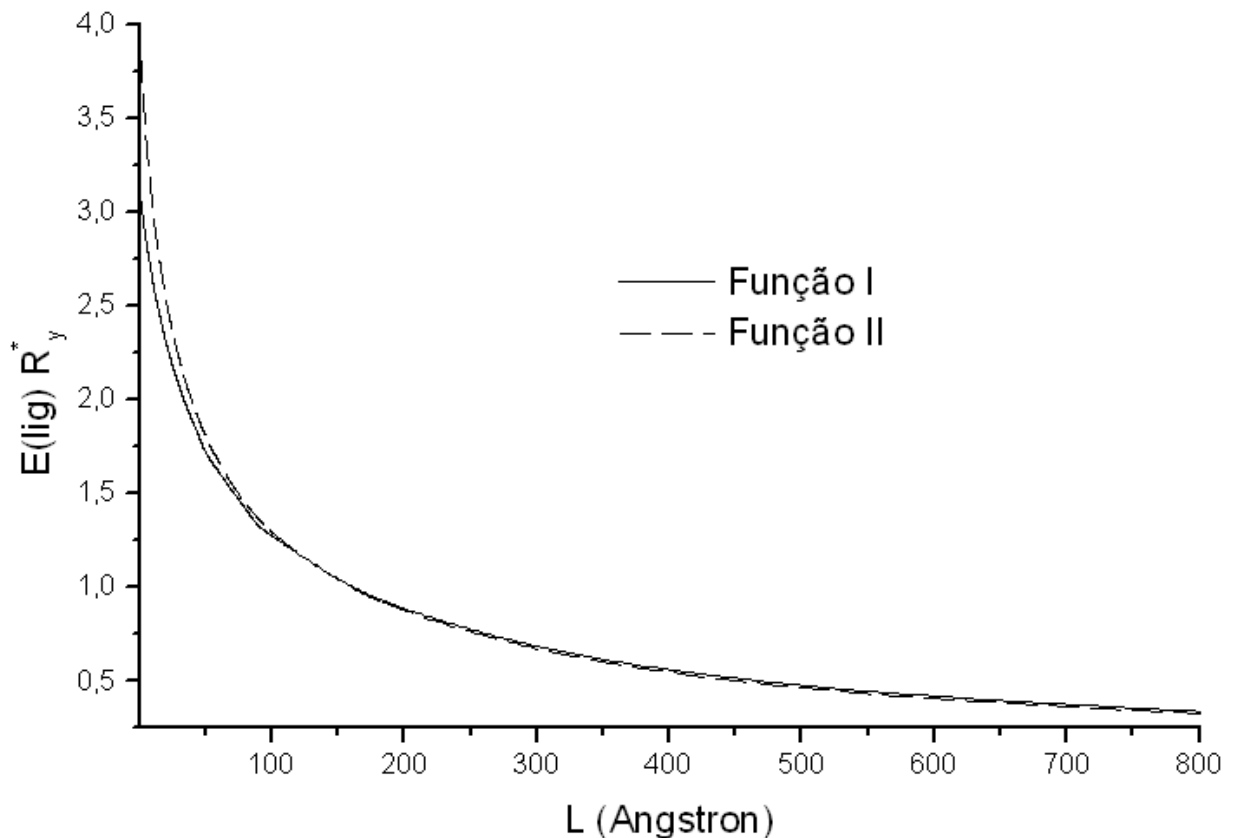


Figura 3.6: Energia de ligação em função da largura do poço quântico para a impureza localizada na borda do poço  $z_i = L/2$ .

Para um elétron ligado a uma impureza na posição  $z_i = L/2$  em um poço quântico com alturas de barreiras de potencial infinito, suas energias de ligações  $E_{lig}$  em função da largura do poço pode ser representada pela Figura 3.6, de acordo com as duas funções de ondas escolhidas como tentativa. Observa-se que para a largura do poço tendendo a infinito a energia de ligação tende a  $0,25R_y^*$  estando de acordo com (BASTARD, 1981) para ambas as funções, no entanto quando a largura do poço diminuía tendendo a zero, o resultado obtido para energia de ligação teve valor satisfatório apenas para a segunda função de onda escolhida como tentativa, que correspondia a uma energia de  $4,0R_y^*$  de acordo com (BASTARD, 1981).

Por meio do cálculo numérico foi possível determinar as energias de ligações  $E_{lig}$  em função da localização da impureza  $z_i$ , referentes as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Para observar qualitativamente o comportamento da energia de ligação  $E_{lig}$  referente a varias posições da impureza dentro do poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito, foram gerados gráficos da energia de ligação normalizada em função do seu valor máximo  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para poços com diferentes larguras conforme será mostrado a seguir.

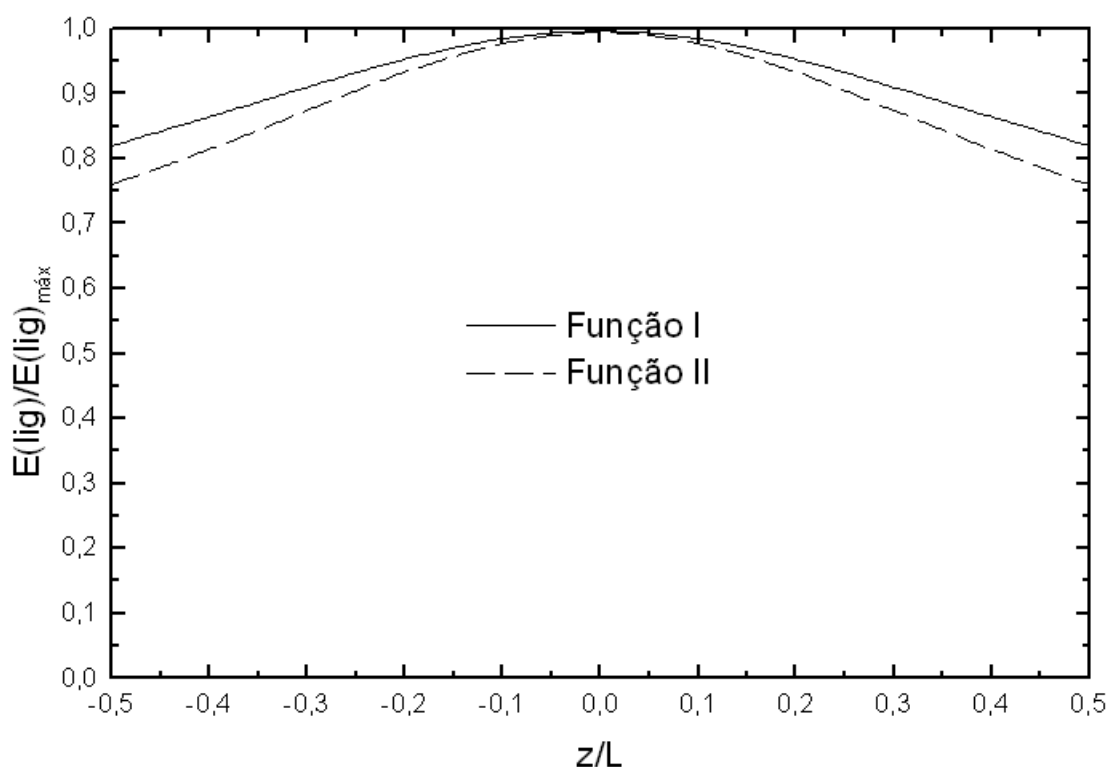


Figura 3.7: Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para  $L = 20\text{\AA}$

A Figura 3.7 representa os valores da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{lig}max$  para o elétron confinado em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito e largura  $L = 20\text{\AA}$  em função da posição da impureza, de acordo com as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Pode-se observar que, a medida que a impureza se desloca do centro do poço  $z_i = 0$  para as borda  $z_i = L/2$  a energia de ligação diminui, de forma que o melhor valor é fornecido pela segunda função de onda escolhida como tentativa correspondendo a  $0,76E_{lig}max$  estando de acordo com o que foi obtido por (BASTARD, 1981). Os resultados apresentados na Figura 3.7 podem ser comparados quantitativamente pelas tabelas 3.6 e 3.7 a seguir.

Tabela 3.6: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 20\text{\AA}$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$gL E_{lig}$
0	1,274728	237,49633	2,821536	1	986,9
2	1,245283	237,53123	2,786628	0,9876	2,9996
4	1,168014	237,62472	2,693138	0,9544	1,6841
6	1,067847	237,75050	2,567359	0,9099	1,4841
8	0,968147	237,881902	2,435960	0,8633	1,5444
10	0,881079	238,002968	2,314894	0,8204	1,7344

Tabela 3.7: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 20\text{\AA}$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	1,693802	236,97204	3,345819	1	10111,1
2	1,667240	237,03192	3,282938	0,9812	1,739607
4	1,596882	237,18940	3,128464	0,9350	1,049793
6	1,504540	237,39403	2,923830	0,8739	0,948447
8	1,411843	237,59820	2,719667	0,8129	1,034758
10	1,331075	237,77643	2,541437	0,7596	1,226656

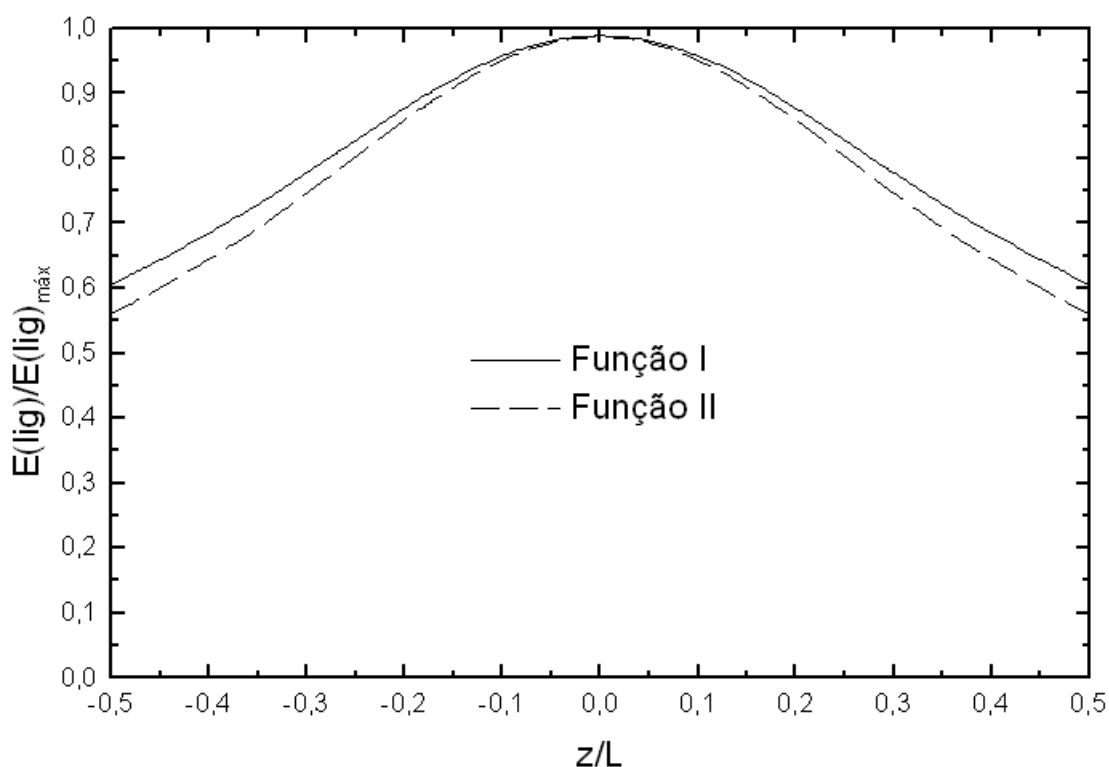


Figura 3.8: Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para  $L = 100\text{\AA}$

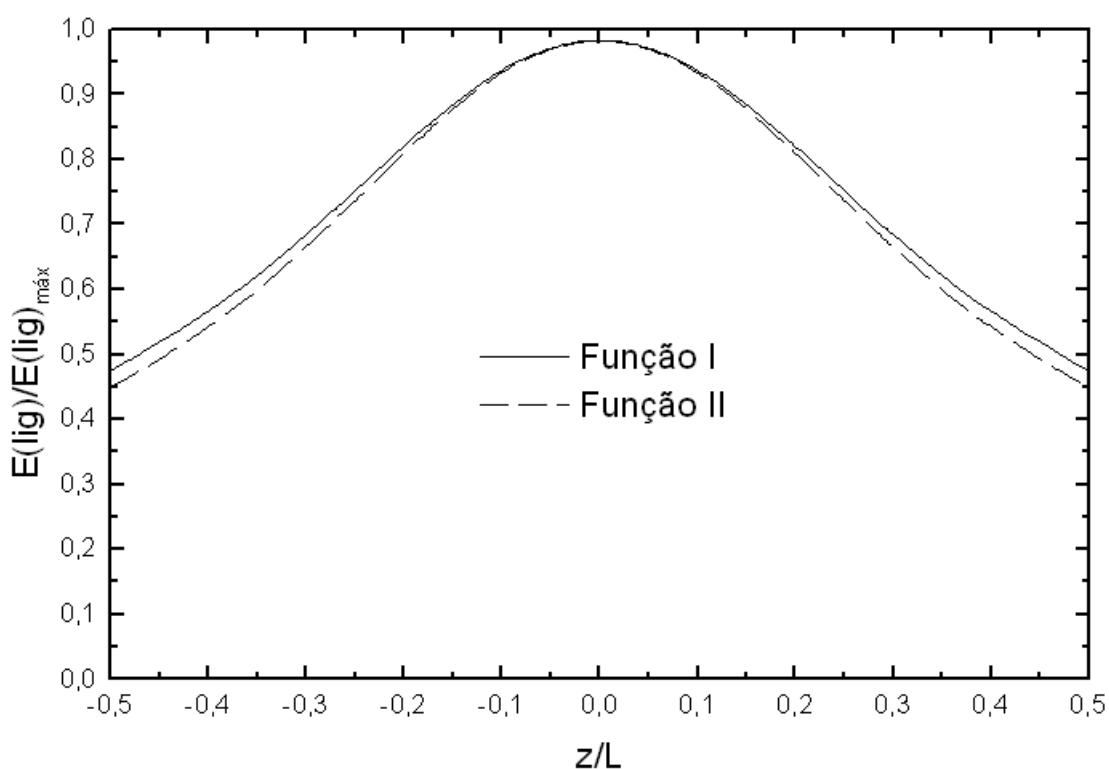
A energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para um elétron confinado em um poço quântico com largura  $L = 100\text{\AA}$  e altura de barreiras de potencial infinito, pode ter um comportamento em função da posição da impureza representada pela Figura 3.8, de acordo com as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Pode-se observar que, a medida que a impureza se desloca do centro do poço  $z_i = 0$  para as borda  $z_i = L/2$  a energia de ligação diminui, de forma que o melhor valor é fornecido pela segunda função de onda escolhida como tentativa, que corresponde a  $0,56E_{ligmax}$ , conforme obtido por (BASTARD, 1981). Os resultados apresentados na Figura 3.8 podem ser comparados quantitativamente pelas tabelas 3.8 e 3.9 a seguir.

Tabela 3.8: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 100\text{\AA}$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	0,759058	7,500111	2,112603	1	394,76
10	0,716222	7,572358	2,040356	0,9658	1,4998
20	0,611182	7,754524	1,858190	0,8796	0,8988
30	0,491570	7,974170	1,638544	0,7756	0,9083
40	0,391635	8,173748	1,438966	0,6811	1,0966
50	0,319600	8,332614	1,280100	0,6059	1,4180

Tabela 3.9: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 100\text{\AA}$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	1,238235	7,313169	2,299546	1	10967,2
10	1,200158	7,403799	2,208915	0,9606	1,265121
20	1,100987	7,631344	1,981371	0,8616	0,706328
30	0,976249	7,902201	1,710513	0,7438	0,746954
40	0,861230	8,141061	1,471654	0,6400	0,949203
50	0,771971	8,323128	1,289586	0,5608	1,286310

Figura 3.9: Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para  $L = 300\text{\AA}$ 

A Figura 3.9 representa os valores da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para o elétron confinado em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito e largura



$L = 300\text{\AA}$  em função da posição da impureza, de acordo com as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Pode-se observar que, a medida que a impureza se desloca do centro do poço  $z_i = 0$  para as borda  $z_i = L/2$  a energia de ligação diminui, de forma que o melhor valor é fornecido pela segunda função de onda escolhida como tentativa, que corresponde a  $0,47E_{lig}max$ , conforme obtido por (BASTARD, 1981). Os resultados apresentados na Figura 3.9 podem ser comparados quantitativamente pelas tabelas 3.10 e 3.11 a seguir.

Tabela 3.10: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 300\text{\AA}$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$gLE_{lig}$
0	0,397403	-0,352347	1,420426	1	386,9
30	0,367245	-0,279862	1,347941	0,9490	1,436482
60	0,294016	-0,101479	1,169558	0,8233	0,805773
90	0,214155	0,101932	0,966148	0,6802	0,896734
120	0,153586	0,271285	0,796794	0,5609	1,278821
150	0,115374	0,393168	0,674911	0,4751	1,876239

Tabela 3.11: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 300\text{\AA}$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$gLE_{lig}$
0	0,880299	-0,406015	1,474095	1	21141,9
30	0,846113	-0,326647	1,394726	0,9461	1,494482
60	0,755778	-0,130394	1,198473	0,8130	0,815273
90	0,641320	0,093994	0,974085	0,6608	0,929754
120	0,538860	0,278378	0,789701	0,5357	1,290668
150	0,465000	0,406885	0,661194	0,4485	1,911659

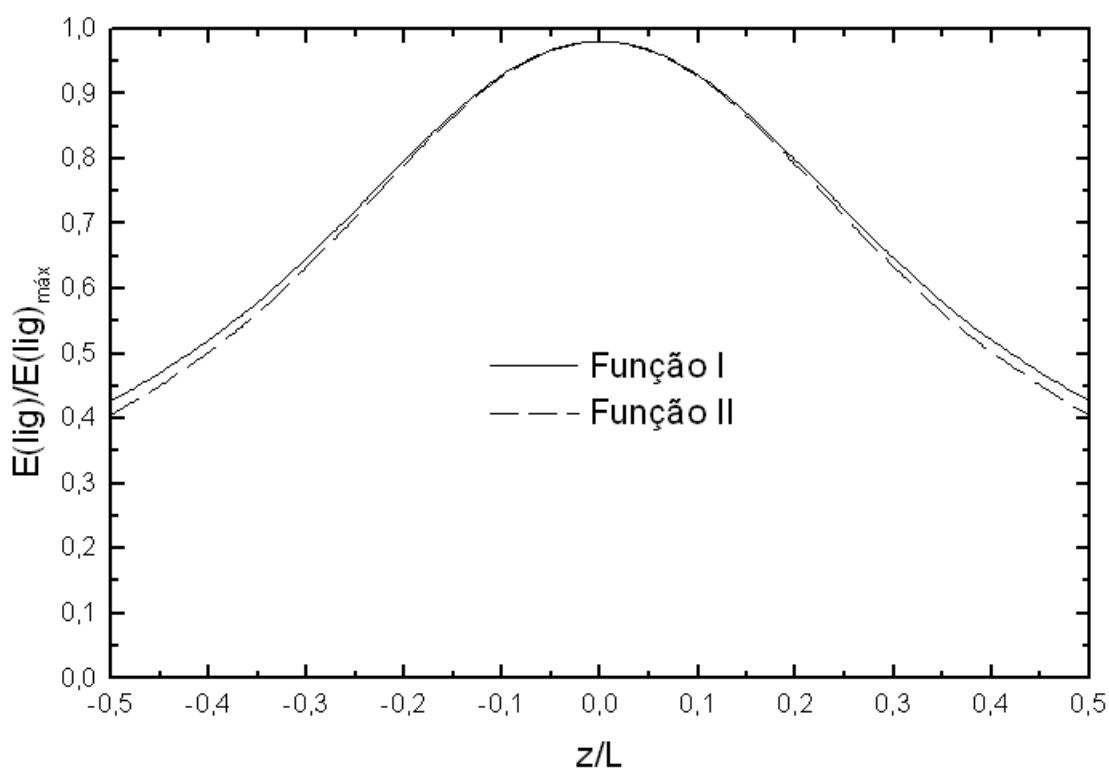


Figura 3.10: Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para  $L = 500\text{\AA}$

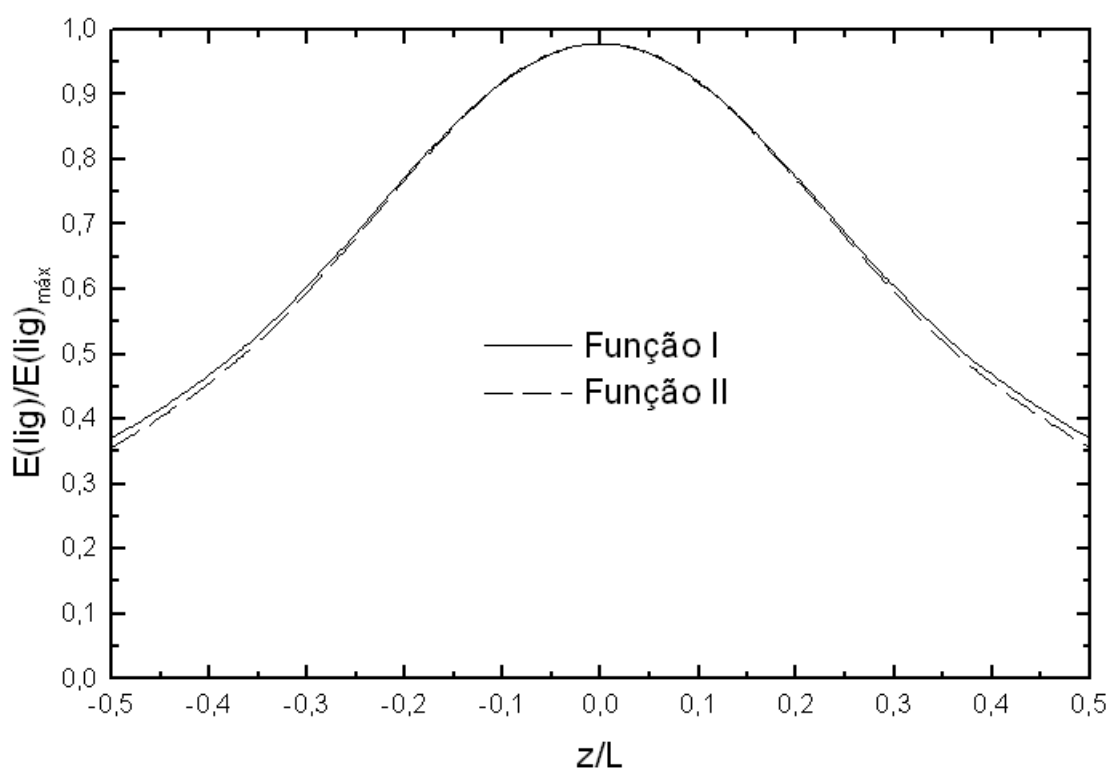
A energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para um elétron confinado em um poço quântico com largura  $L = 500\text{\AA}$  e altura de barreiras de potencial infinito, pode ter um comportamento em função da posição da impureza representada pela Figura 3.10, de acordo com as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Pode-se observar que, a medida que a impureza se desloca do centro do poço  $z_i = 0$  para as borda  $z_i = L/2$  a energia de ligação diminui, porém próximo da posição  $z_i = 0$  a energia de ligação deveria diminuir lentamente conforme foi observado por (BASTARD, 1981), mas os resultados obtidos para a energia de ligação na borda do poço  $z_i = L/2$  estão de acordo com os que foram obtidos por (BASTARD, 1981), no entanto o melhor resultado está representado pela segunda função de onda escolhida como tentativa que corresponde a  $0,40E_{ligmax}$ . Os resultados apresentados na Figura 3.10 podem ser comparados quantitativamente pelas tabelas 3.12 e 3.13 a seguir.

Tabela 3.12: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 500\text{\AA}$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	0,273888	-0,729891	1,114399	1	394,7
50	0,251466	-0,665661	1,050170	0,9424	1,7702
100	0,196634	-0,508114	0,892622	0,8010	1,0361
150	0,136943	-0,331075	0,715584	0,6421	1,1819
200	0,093144	-0,188490	0,572999	0,5142	1,6586
250	0,067166	-0,090315	0,474824	0,4261	2,4827

Tabela 3.13: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 500\text{\AA}$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	0,729037	-0,754781	1,139290	1	29260,7
50	0,698849	-0,687078	1,071587	0,9406	1,831841
100	0,618058	-0,519936	0,904445	0,7939	0,941841
150	0,514097	-0,330723	0,715232	0,6278	1,108507
200	0,421485	-0,179407	0,563915	0,4950	1,610080
250	0,356879	-0,078047	0,462555	0,4060	2,478155

Figura 3.11: Energia de ligação normalizada em função da posição da impureza para  $L = 1000\text{\AA}$ 

A Figura 3.11 representa os valores da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para o elétron confinado em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito e largura

$L = 1000\text{\AA}$  em função da posição da impureza, de acordo com as funções de ondas 3.71 e 3.72 escolhidas como tentativa. Nota-se que, a medida que a impureza se desloca do centro do poço  $z_i = 0$  para as borda  $z_i = L/2$  a energia de ligação diminui, porém assim como foi observado no poço com largura  $L = 500\text{\AA}$  nas proximidades de  $z_i = 0$  os resultados não condizem com os que foram obtidos por (BASTARD, 1981), no entanto os resultados obtidos para a energia de ligação na borda do poço  $z_i = L/2$  estão de acordo com (BASTARD, 1981), correspondendo a um valor em torno de  $0,36E_{lig}max$ . Os resultados apresentados na Figura 3.11 podem ser comparados quantitativamente pelas tabelas 3.14 e 3.15.

Tabela 3.14: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 1000\text{\AA}$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$g_L E_{lig}$
0	0,156467	-0,665087	0,761215	1	419,4
100	0,142846	-0,615677	0,711845	0,9351	2,569754
200	0,108979	-0,494265	0,590393	0,7756	1,198936
300	0,071623	-0,359075	0,455202	0,5980	1,476138
400	0,045080	-0,254144	0,350271	0,4601	2,217624
500	0,030616	-0,185949	0,282077	0,3706	3,036712

Tabela 3.15: Energias em função da posição  $z_i$  da impureza para  $L = 1000\text{\AA}$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$\beta$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$g_L E_{lig}$
0	0,551088	-0,671400	0,767528	1	48871,3
100	0,526993	-0,621010	0,717137	0,9343	2,699445
200	0,461129	-0,496325	0,592452	0,7720	1,200956
300	0,373701	-0,355959	0,452086	0,5890	1,496330
400	0,295682	-0,247114	0,343241	0,4472	2,316923
500	0,243823	-0,177855	0,273982	0,3570	3,736480

Os resultados obtidos numericamente pela equação

$$g_L(E_{lig}) = \frac{2}{L} \frac{1}{\left| \frac{dE_{lig}}{dz_i} \right|}, \quad (3.76)$$

para a densidade estado  $g_L(E_{lig})$  em função da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{lig}max$ , para diferentes larguras do poço quântico, foram melhores para segunda função de onda tentativa, portanto serão apresentados por meio de um gráfico conforme mostra a seguir.

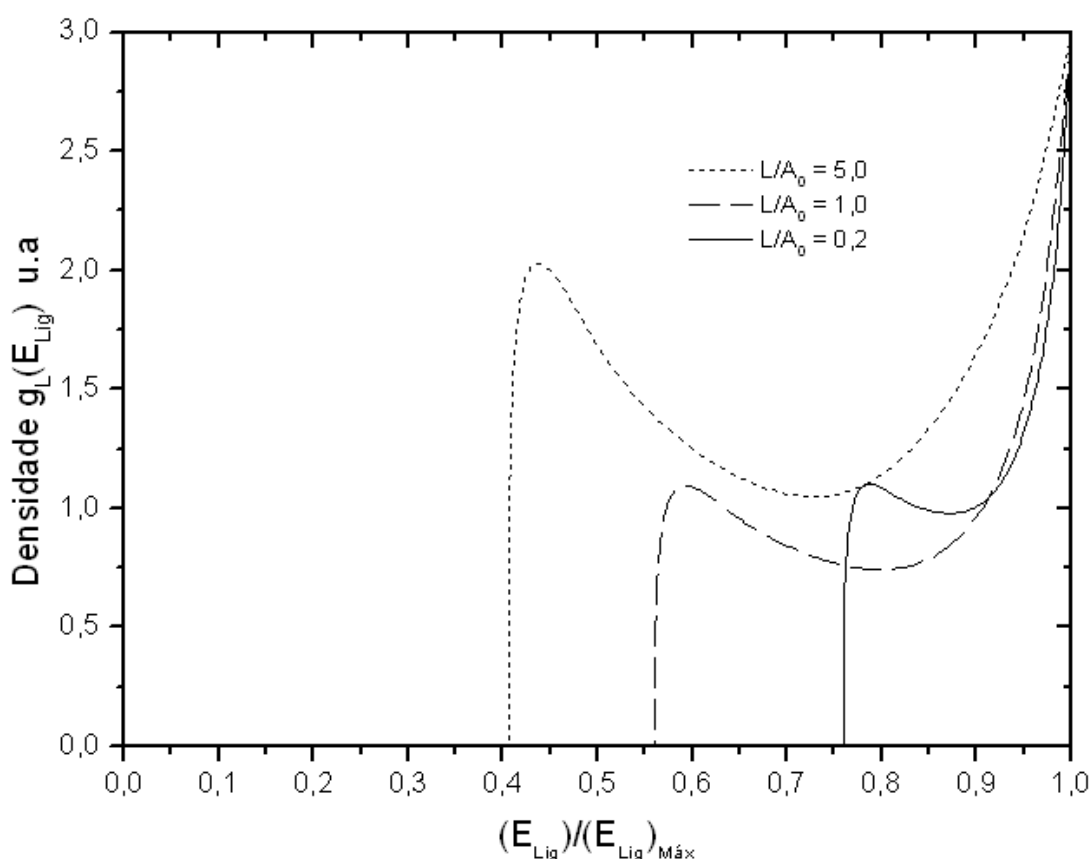


Figura 3.12: Densidade de estado de impureza em função da energia de ligação normalizada para  $L = 20\text{\AA}$ ,  $L = 100\text{\AA}$  e  $L = 500\text{\AA}$

A Figura 3.12 representa o comportamento da densidade de estados de impureza doadora  $g_L(E_{lig})$  em um poço quântico com altura de barreiras de potencial infinito e diferentes larguras do poço em função da energia de ligação normalizada. Pode-se observar que no centro do poço a densidade de estados de impurezas doadoras tende para infinito, no entanto a medida que a impureza se desloca afastando-se de  $z_i = 0$  a densidade de estado diminui abruptamente voltando a aumentar próximo da borda do poço, porém apenas os resultados obtidos até  $L = 300\text{\AA}$  estão de acordo com os que foram obtidos por (BASTARD, 1981), pois para poços com larguras superiores a  $L = 300\text{\AA}$  a densidade de estados deveria diminuir tendendo a um valor constante na borda do poço  $z_i = L/2$  e não voltar a aumentar conforme observados na Figura 3.12. Deve-se ressaltar que os resultados não estão de acordo com (BASTARD, 1981) para poços com larguras superiores a  $L = 300\text{\AA}$  devido à forma para as funções de ondas escolhidas como tentativa. Uma forma de obter melhores resultados nessas regiões seria considerar mais um parâmetro variacional na função de onda relacionada com a coordenada  $z$ , do tipo  $e^{-\alpha z}$ , justamente como foi a função escolhida por (BASTARD, 1981), porém as estruturas de poços quânticos geralmente apresenta largura em torno de no máximo  $300\text{\AA}$  correspondendo ao limite onde os resultados

obtidos pela função 3.72 foi satisfatório. Os resultados apresentados na Figura 3.12 podem ser melhor comparados pelas tabelas 3.7, 3.9 e 3.13 apresentadas anteriormente.

### 3.4.2 Poço Quântico com Altura de Barreiras de Potencial Finito.

Para determinar a energia em um poço quântico com altura de barreiras de potencial finito aplicou-se o Método Variacional em duas funções de ondas escolhidas como tentativa conforme mostra abaixo: Primeira função de onda escolhida como tentativa

$$\psi_I = C e^{-\beta \rho^2} e^{im\theta} e^{k_2 z}; \quad (3.77)$$

$$\psi_{II} = B e^{-\beta \rho^2} e^{im\theta} \cos(k_1 z); \quad (3.78)$$

$$\psi_{III} = C e^{-\beta \rho^2} e^{im\theta} e^{-k_2 z}. \quad (3.79)$$

Segunda função de onda escolhida como tentativa

$$\varphi_I = C e^{-\beta \rho} e^{im\theta} e^{k_2 z}; \quad (3.80)$$

$$\varphi_{II} = B e^{-\beta \rho} e^{im\theta} \cos(k_1 z); \quad (3.81)$$

$$\varphi_{III} = C e^{-\beta \rho} e^{im\theta} e^{-k_2 z}. \quad (3.82)$$

Em que *I* e *III* corresponde as regiões de  $Al_x Ga_{1-x} As$ , onde *x* é a concentração de alumínio na liga de  $Al_x Ga_{1-x} As$  e *II* corresponde a região de confinamento do elétron no  $GaAs$ . A massa efetiva do elétron para região de  $GaAs$  é dada por  $m_1 = 0,067 m_e$  e para região de  $Al_x Ga_{1-x} As$  é dada por  $m_2 = (0,067 + 0,083x) m_e$ , sendo  $m_e$  a massa do elétron livre correspondente a  $9,1 \cdot 10^{-31} Kg$ . Após aplicar o Método Variacional nas duas funções de ondas escolhidas como tentativa obteve-se respectivamente as expressões  $E_1$  e  $E_2$  para as energias do elétron confinado em um poço quântico com altura de barreira de potencial finito conforme mostra a seguir.

$$\begin{aligned} E_1 = & \frac{\pi B^2}{k_2} \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) \left[ \frac{\delta(2\beta - k_2^2) + V_0}{2\beta} \right] + \frac{\pi B^2}{4\beta} (2\beta + K_1^2) \left( L + \frac{\text{sen}(k_1 L)}{k_1} \right) \\ & - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \frac{e^{-2\beta \rho^2} e^{2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \\ & - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{\frac{L}{2}}^\infty \frac{e^{-2\beta \rho^2} e^{-2k_2 z} \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \\ & - 4\pi B^2 \int_0^\infty \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{e^{-2\beta \rho^2} \cos^2(k_1 z) \rho d\rho dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \end{aligned} \quad (3.83)$$

$$\begin{aligned}
E_2 = \pi B^2 & \left[ \frac{\beta^2 + k_1^2}{4\beta^2} \left( L + \frac{\text{sen}(k_1 L)}{K_1} \right) + \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) \left( \frac{\delta(\beta^2 - k_2^2) + V_0}{2k_2\beta^2} \right) \right] \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{-\infty}^{-L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} e^{2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \\
& - 4\pi B^2 \int_0^\infty \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-2\beta\rho} e^{-2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \\
& - 4\pi B^2 \cos^2 \left( \frac{k_1 L}{2} \right) e^{k_2 L} \int_0^\infty \int_{L/2}^\infty \frac{e^{-2\beta\rho} e^{-2k_2 z} dz}{[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}} \rho d\rho dz \quad (3.84)
\end{aligned}$$

As expressões para as energias 3.83 e 3.84 obtidas a partir das duas funções de ondas tentativas podem ser resolvidas numericamente, utilizando-se as concentrações  $x$  de alumínio iguais a 0,1, 0,2 e 0,3, que fazem a altura da barreira de potencial serem respectivamente  $65,2\text{meV}$ ,  $136,1\text{meV}$  e  $212,6\text{meV}$ , porém em unidades do Rydberg efetivo estes valores podem ser dados por  $11,19R_y^*$ ,  $23,34R_y^*$  e  $36,46R_y^*$ . Para obter a energia deve-se minimizar as expressões 3.83 e 3.84 em termos do parâmetro variacional  $\beta$ , para isto serão considerados o Rydberg efetivo e o raio de bohr efetivo iguais a  $5,83\text{meV}$  e  $98,69\text{meV}$  respectivamente conforme foi utilizado para o poço com altura de barreira de potencial infinito. Sendo assim os resultados obtidos podem ser representados pelos gráficos a seguir.

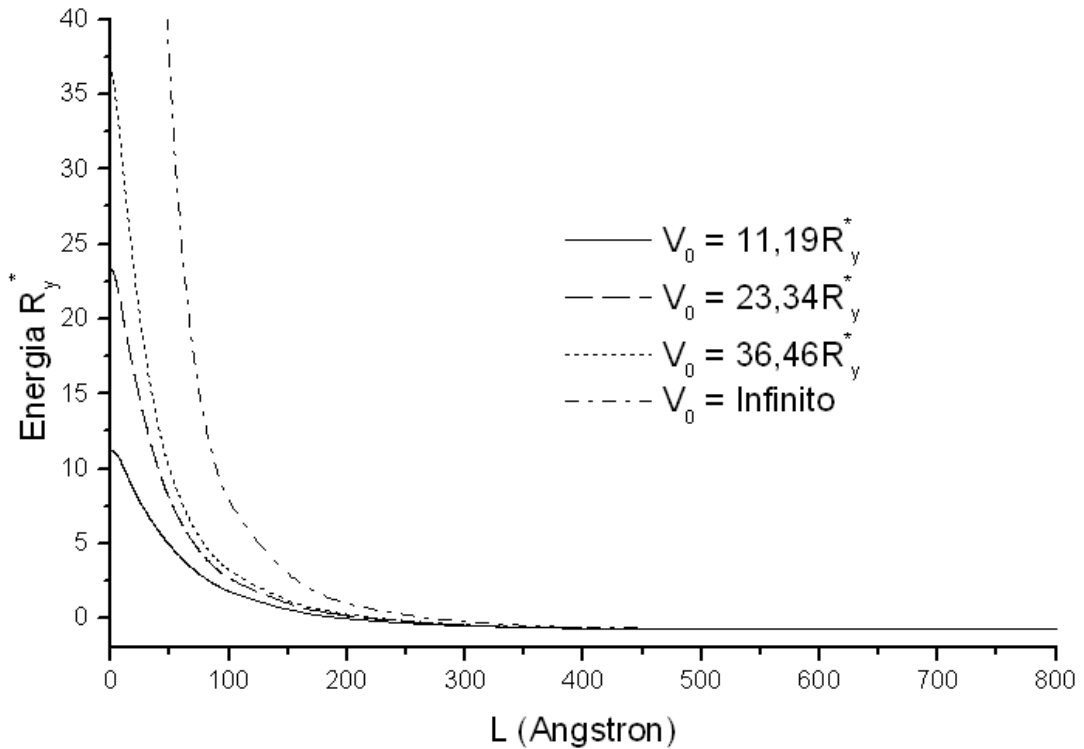


Figura 3.13: Energia  $E$  para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função I e  $z_i = 0$ .

A Figura 3.13 representa os valores das energias do elétron em um poço com altura de barreiras de potencial finito em função da largura do poço com a impureza localizada em  $z_i = 0$ , em que as curvas representam o comportamento da energia para cada altura da barreira de potencial obtidas com a primeira função de onda escolhida como tentativa. Pode-se notar que para um poço com largura superior  $300\text{\AA}$  a energia do elétron diminui assumindo praticamente os mesmos valores para qualquer altura da barreira de potencial, pois para poços muito largos o elétron que está ligado à impureza no centro do poço não sofre influência das barreiras de potencial, no entanto quando o poço diminui tendendo a zero a energia do elétron aumenta até atingir o valor da altura da barreira de potencial, pois a partir deste valor o elétron consegue penetrar na barreira de potencial, porém quando a altura da barreira de potencial se torna infinita o elétron não consegue escapar.

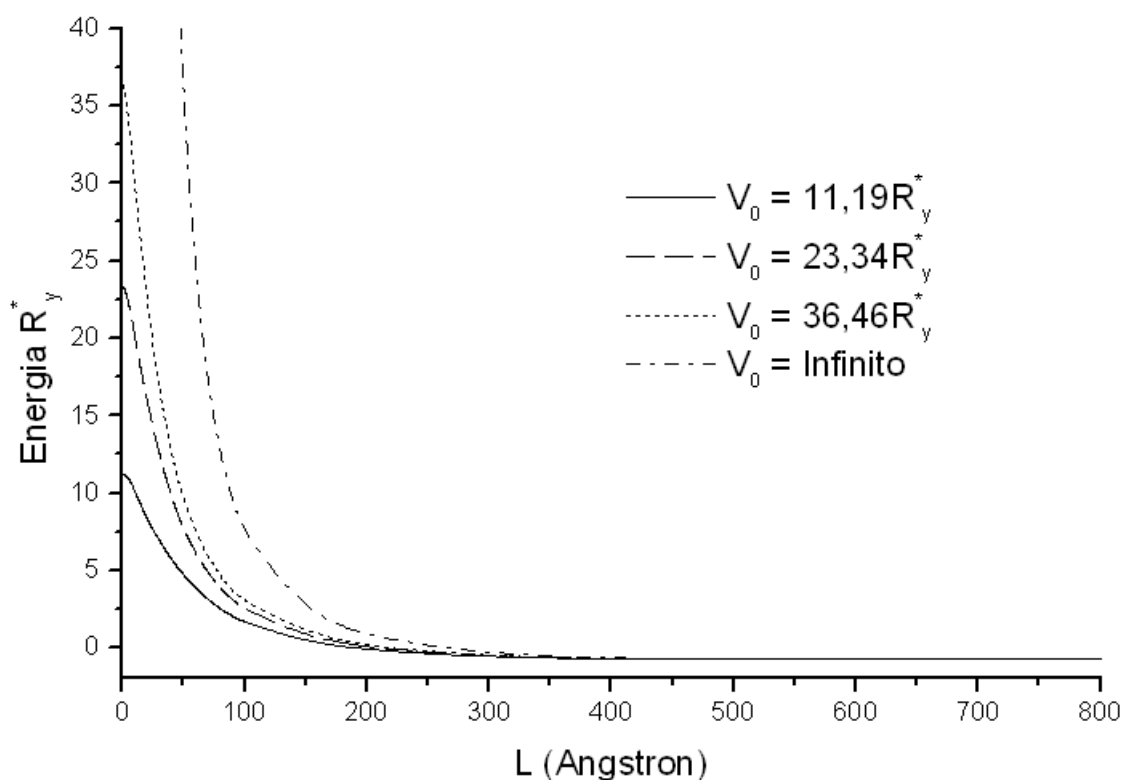


Figura 3.14: Energia  $E$  para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função II e  $z_i = 0$ .

As energias  $E$  para o elétron em um poço com várias alturas de barreiras de potencial em função da largura do poço com a impureza localizada em  $z_i = 0$  obtidas com a segunda função de onda tentativa, estão representadas pela Figura 3.14. Nota-se que as curvas para as energias em função da largura do poço praticamente não apresentaram diferenças significativas em relação àqueles resultados da Figura 3.13 obtidos com a primeira função, no entanto para comparar quantitativamente os resultados referentes às duas funções de ondas pode-se observar as tabelas



3.16, 3.17 e 3.28 a seguir.

Tabela 3.16: Energias em função da largura do poço para  $z_i = 0$  e potencial  $V_0 = 11,19R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{Å})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	11,183356	11,182957	0,000398	11,183355	11,183354	0,000001
5	11,097718	11,025978	0,071740	11,097718	11,011320	0,086399
10	10,841500	10,293295	0,548206	10,841500	10,238141	0,603359
15	10,448802	9,324013	1,124789	10,448802	9,250319	1,198411
20	9,959559	8,469614	1,489944	9,959559	8,382906	1,576652
25	9,413480	7,739390	1,674089	9,413480	7,640163	1,773317
30	8,843882	7,077708	1,766175	8,843882	6,968108	1,875775
35	8,275486	6,459294	1,816192	8,275486	6,342162	1,933324
40	7,724857	5,880134	1,844722	7,724857	5,758076	1,966781
45	7,202005	5,341766	1,860239	7,202005	5,216886	1,985119
50	6,712176	4,845216	1,866961	6,712176	4,719131	1,993045
60	5,837593	3,974133	1,863460	5,837593	3,848945	1,988648
70	5,097171	3,250574	1,846597	5,097171	3,128915	1,968256
80	4,474461	2,651754	1,822707	4,474461	2,534926	1,939535
90	3,950696	2,155475	1,795221	3,950696	2,044033	1,906664
100	3,508618	1,742557	1,766060	3,508618	1,636641	1,871977
150	2,095248	0,474076	1,621171	2,095248	0,392865	1,702382
200	1,383431	-0,111984	1,495415	1,383431	-0,175206	1,558637
300	0,729147	-0,571293	1,300440	0,729147	-0,612191	1,341339
400	0,448646	-0,708970	1,157616	0,448646	-0,737242	1,185888
500	0,303510	-0,744492	1,048002	0,303510	-0,764927	1,068437
600	0,218872	-0,741848	0,96072	0,218872	-0,757078	0,975951

Tabela 3.17: Energias em função da largura do poço para  $z_i = 0$  e potencial  $V_0 = 23,34R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{Å})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	23,323907	23,323662	0,000275	23,323907	23,323300	0,000608
5	22,916678	22,600486	0,316192	22,916678	22,549839	0,366839
10	21,765688	20,372150	1,393538	21,765688	20,259327	1,506361
15	20,166964	18,206962	1,960002	20,166964	18,064356	2,102618
20	18,395514	16,267017	2,128498	18,395514	16,102239	2,293275
25	16,639609	14,463476	2,176134	16,639609	14,285540	2,354069
30	14,999666	12,814561	2,185106	14,999666	12,630597	2,369069
35	13,516516	11,339496	2,177019	13,516516	11,154212	2,362303
40	12,197748	10,037596	2,160152	12,197748	9,853932	2,343816
45	11,034840	8,896190	2,138651	11,034840	8,715929	2,318912
50	10,012711	7,897930	2,114780	10,012711	7,722117	2,290594
60	8,324293	6,259787	2,064506	8,324293	6,094299	2,229994
70	7,010407	4,996056	2,014350	7,010407	4,841318	2,169089
80	5,975268	4,009266	1,966003	5,975268	3,864883	2,110385
90	5,148575	3,228586	1,919989	5,148575	3,093867	2,054708
100	4,479516	2,603118	1,876398	4,479516	2,477287	2,002229
150	2,500186	0,809542	1,690644	2,500186	0,717808	1,782378
200	1,589610	0,043824	1,545785	1,589610	-0,025871	1,615481
300	0,804022	-0,528321	1,332342	0,804022	-0,572318	1,376340
400	0,483870	-0,696571	1,180441	0,483870	-0,726604	1,210474
500	0,322816	-0,742624	1,065440	0,322816	-0,764166	1,086982
600	0,230579	-0,744039	0,974618	0,230579	-0,760011	0,990590

Tabela 3.18: Energias em função da largura do poço para  $z_i = 0$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{Å})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	36,416403	36,414004	0,002398	36,416403	36,313316	0,030865
5	35,346589	34,617842	0,728748	35,346589	34,521227	0,825362
10	32,521851	30,447647	2,074203	32,521851	30,276995	2,244856
15	28,986952	26,593309	2,393642	28,986952	26,385210	2,601742
20	25,465653	23,039744	2,425908	25,465653	22,813304	2,652348
25	22,284456	19,880173	2,404283	22,284456	19,648508	2,635948
30	19,530629	17,162624	2,368005	19,530630	16,932848	2,597781
35	17,187573	14,859854	2,327719	17,187573	14,635583	2,551990
40	15,204095	12,916807	2,287288	15,204095	12,699780	2,504315
45	13,523509	11,275366	2,248143	13,523509	11,066315	2,457194
50	12,094143	9,883391	2,210752	12,094143	9,682509	2,411634
60	9,821541	7,680143	2,141398	9,821541	7,495146	2,326396
70	8,122772	6,044181	2,078591	8,122772	5,873795	2,248977
80	6,824292	4,802993	2,021299	6,824292	4,645753	2,178539
90	5,811455	3,842826	1,968628	5,811455	3,697330	2,114125
100	5,007105	3,087224	1,919880	5,007105	2,952215	2,054890
150	2,707702	0,988421	1,719281	2,707702	0,981863	1,815840
200	1,691866	0,124763	1,567027	1,691866	0,052101	1,639765
300	0,839823	-0,506348	1,346171	0,839823	-0,551762	1,391585
400	0,500372	-0,690050	1,190422	0,500372	-0,720885	1,221257
500	0,331742	-0,741351	1,073094	0,331742	-0,763394	1,095137
600	0,235942	-0,744783	0,980726	0,235942	-0,761091	0,997033

Durante o cálculo numérico das energias foram determinadas também os valores das energias sem impureza  $E_{SI}$ , de forma que pode-se determinar as energias de ligações  $E_{Lig}$  do elétron por  $E_{Lig} = E_{SI} - E$ . O comportamento da energia de ligação pode ser observada pelos gráficos que se seguem:

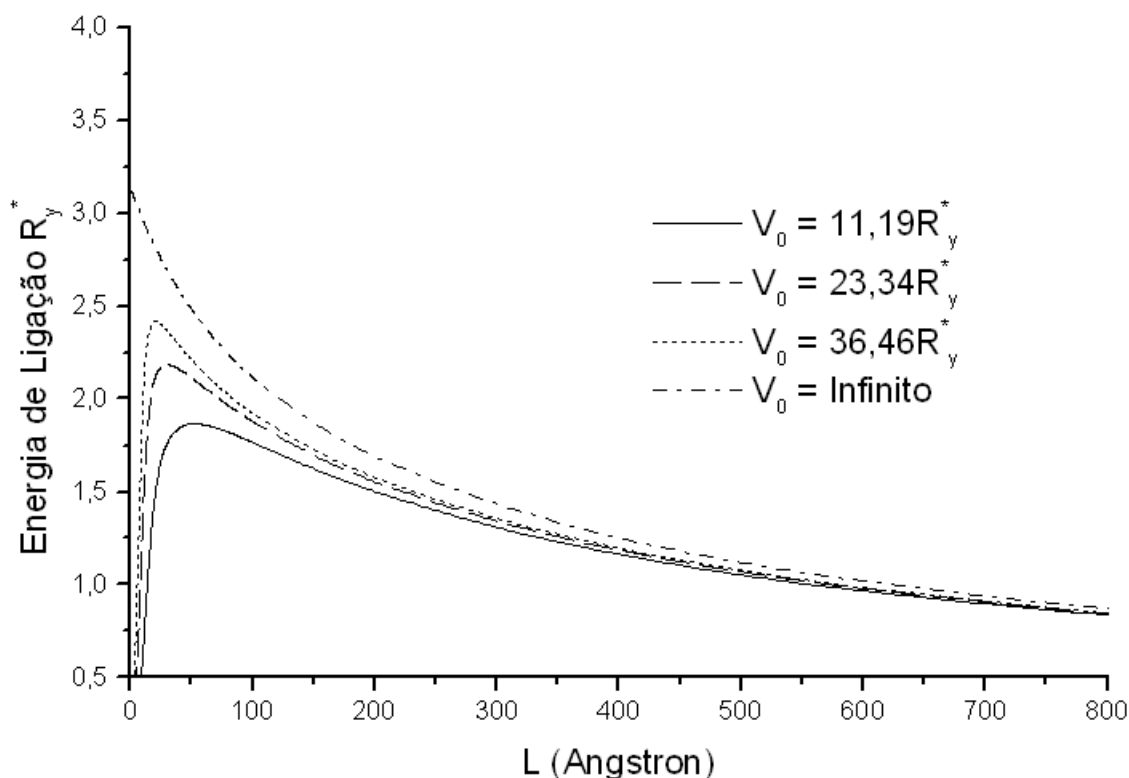


Figura 3.15: Energia  $E_{lig}$  para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função I e  $z_i = 0$ .

A Figura 3.15 representa a energia de ligação do elétron em um poço com várias alturas de barreiras de potencial em função de sua largura para a impureza localizada em  $z_i = 0$ , obtidas com a primeira função de onda tentativa. Pode-se observar que para poços muito largos as energias de ligações tem valores muito próximos para qualquer potencial de confinamento, no entanto quando a largura do poço diminui tendendo a zero as energias de ligações vão aumentando até atingir um valor máximo para cada altura de barreiras de potencial, a partir desse valor máximo, se a largura do poço continuar diminuindo a energia de ligação diminui tendendo a zero, pois o elétron consegue penetrar na barreira de potencial, porém para o poço com altura de barreira de potencial infinito o elétron não consegue escapar da região de confinamento e sua energia de ligação deve tender a  $4,0R_y^*$ , no entanto para a primeira função de onda tentativa o resultado para a energia de ligação para o poço tendendo a zero não foi satisfatório de acordo com (BASTARD, 1981).

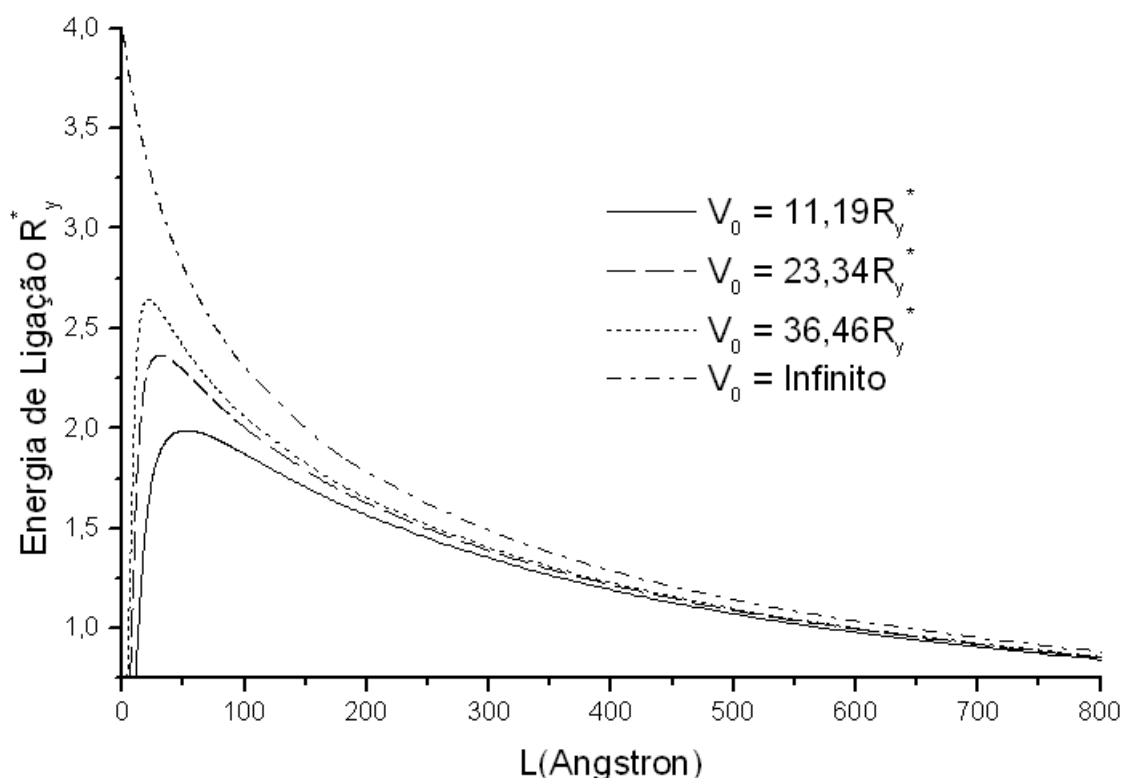


Figura 3.16: Energia  $E_{lig}$  para diferentes potenciais em função da largura do poço quântico referente a função II e  $z_i = 0$ .

O comportamento para a energia de ligação de um elétron em um poço com várias alturas de barreiras de potencial em função de sua largura e com a impureza localizada em  $z_i = 0$  pode ser representada pela Figura 3.16 conforme foi obtido com a segunda função de onda tentativa. Pode-se observar que para poços muito largos as energias de ligações tem valores muito próximos para qualquer potencial de confinamento, no entanto quando a largura do poço diminui tendendo a zero as energias de ligações vão aumentando até atingir um valor máximo para cada altura de barreiras de potencial, na qual a partir desse valor máximo, se a largura do poço continuar diminuindo a energia de ligação diminui tendendo a zero, pois o elétron consegue penetrar na barreira de potencial, porém para o poço com altura de barreira de potencial infinito o elétron não consegue escapar da região de confinamento e sua energia de ligação deve tender a  $4,0R_y^*$  conforme foi obtido com a segunda função de onda tentativa. Como os resultados obtidos pelo Método Variacional são melhores quanto menor for o valor da energia para o elétron confinado em um poço quântico no estado fundamental, pode-se observar por meio da relação  $E_{Lig} = E_{SI} - E$  que quanto maior for o valor da energia de ligação melhor é a função de onda escolhida como tentativa, portanto os resultados obtidos com a segunda função de onda foram melhores que os obtidos pela primeira função, conforme pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.16, 3.17 e 3.28 apresentadas anteriormente.

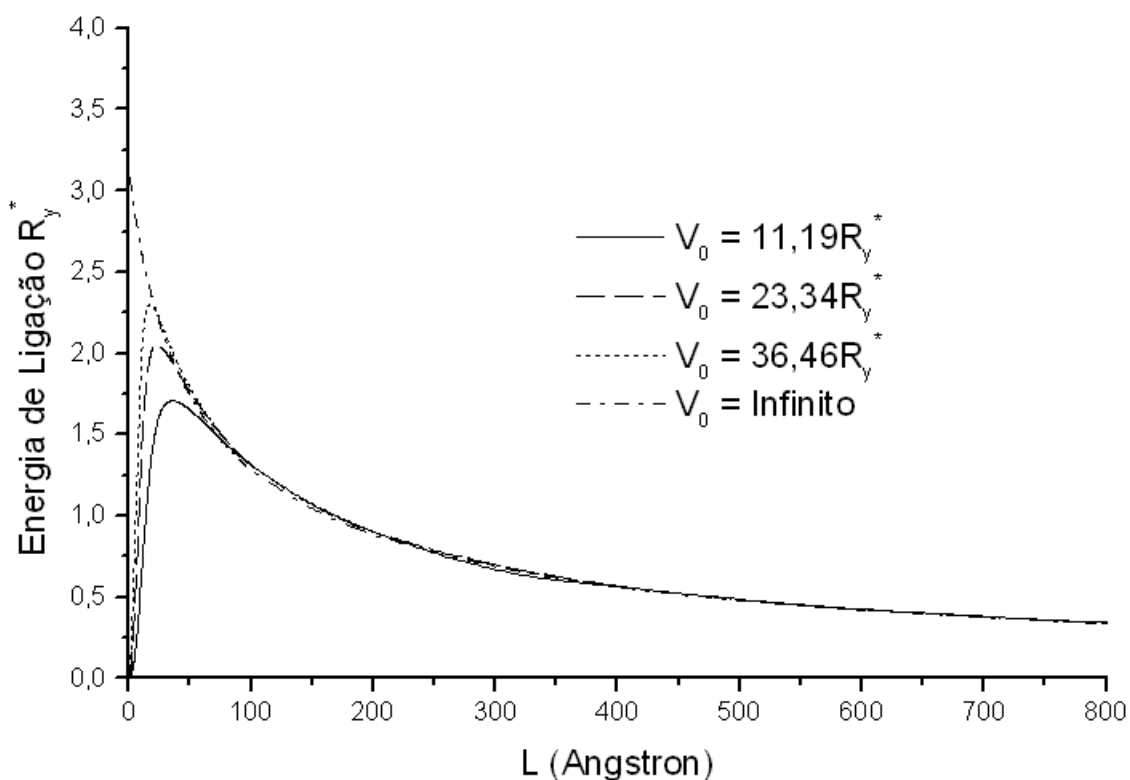


Figura 3.17: Energia de ligação para diferentes potenciais em função da largura do poço e  $z_i = L/2$  referente a função I.

A Figura 3.17 representa a energia de ligação do elétron em um poço com várias alturas de barreiras de potencial em função de sua largura para a impureza localizada em  $z_i = L/2$ , obtidas com a primeira função de onda escolhida como tentativa. Pode-se observar que para poços com larguras superiores a  $100\text{\AA}$  as energias de ligações tem valores muito próximos para qualquer potencial de confinamento, pois como a impureza está localizada na borda do poço o elétron não sofre influência da outra borda até próximo de  $100\text{\AA}$ , no entanto quando a largura do poço diminui tendendo a zero as energias de ligações vão aumentando até atingir um valor máximo para cada altura de barreiras de potencial, na qual a partir desse valor se a largura do poço continuar diminuindo a energia de ligação diminui até tender a zero, pois o elétron fica pressionado pelas paredes do poço de potencial e consegue penetrar na barreira, porém para o poço com altura de barreira de potencial infinito o elétron não consegue escapar da região de confinamento e sua energia de ligação deve tender a  $4,0R_y^*$ , porém como a primeira função de onda tentativa não teve um comportamento muito bom para a impureza localizada em  $z_i = 0$  é de se esperar que os resultados para  $z_i = L/2$  também não seja, pois como pode-se observar quando a largura do poço tende a zero a energia de ligação tendeu para próximo de  $3,0R_y^*$  o que não condiz com os resultados de (BASTARD, 1981).

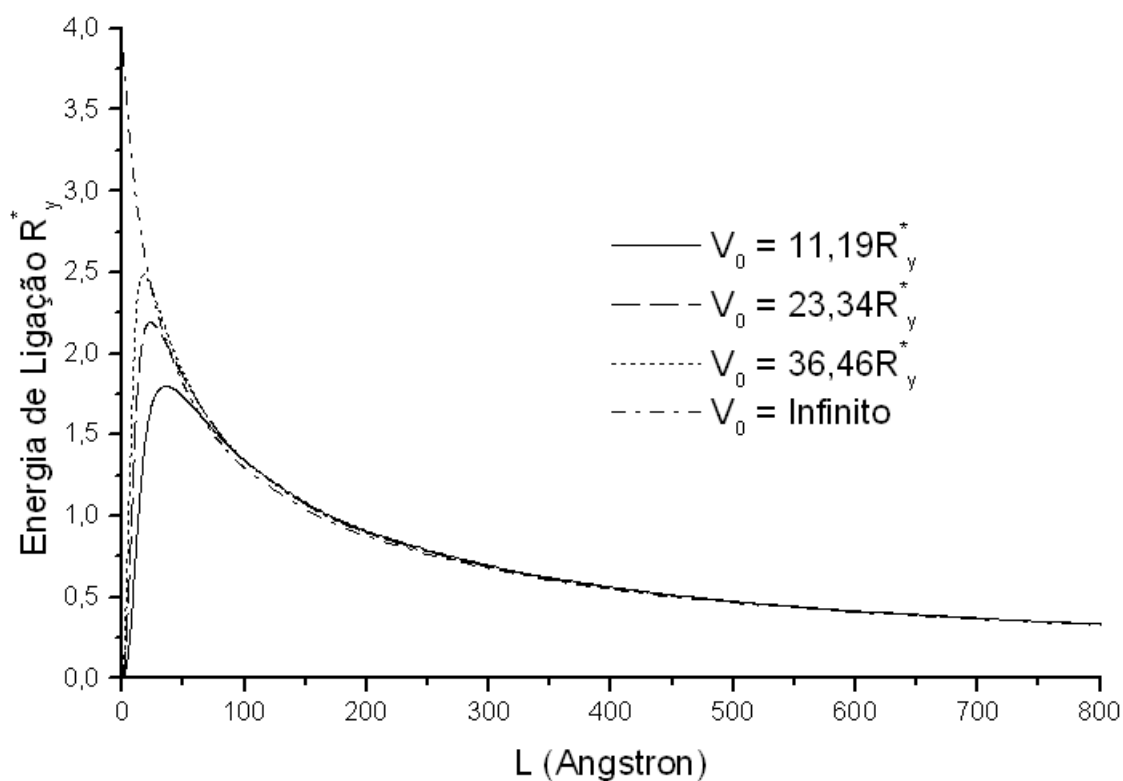


Figura 3.18: Energia de ligação para diferentes potenciais em função da largura do poço e  $z_i = L/2$  referente a função II

O comportamento para a energia de ligação de um elétron em um poço com várias alturas de barreiras de potencial em função de sua largura e com a impureza localizada em  $z_i = L/2$  pode ser observado pela Figura 3.18, conforme foi obtido com a segunda função de onda escolhida como tentativa. Pode-se observar que para poços com larguras superiores a  $100\text{\AA}$  as energias de ligações tem valores muito próximos para qualquer potencial de confinamento, semelhante ao que foi obtido pela primeira função de onda tentativa, no entanto quando a largura do poço diminui tendendo a zero as energias de ligações vão aumentando até atingir um valor máximo para cada altura de barreiras de potencial, na qual a partir desse valor se a largura do poço continuar diminuindo a energia de ligação diminui até tender a zero, pois o elétron fica pressionado pelas paredes do poço de potencial e consegue penetrar na barreira de potencial, porém para o poço com altura de barreira de potencial infinito o elétron não consegue escapar da região de confinamento e sua energia de ligação tende a  $4,0R_y^*$  de acordo com (BASTARD, 1981). Para comparar quantitativamente os resultados obtidos pelas duas função de ondas tentativa pode-se observar as tabelas 3.19, 3.20 e 3.29 a seguir.

Tabela 3.19: Energias em função do raio para  $z_i = L/2$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{\AA})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	11,183356	11,182957	0,000398	11,183356	11,183345	0,000001
5	11,097718	11,026032	0,071683	11,097718	11,011416	0,086302
10	10,841500	10,295145	0,546356	10,841500	10,240572	0,600928
15	10,448802	9,332802	1,115999	10,448802	9,261427	1,187375
20	9,959559	8,442677	1,466881	9,959559	8,411787	1,547772
25	9,413480	7,784446	1,629034	9,413480	7,696443	1,717037
30	8,843882	7,151163	1,692719	8,843882	7,059479	1,784403
35	8,275486	6,565516	1,709970	8,275486	6,473624	1,801862
40	7,724857	6,021442	1,703414	7,724857	5,932022	1,792834
45	7,202005	5,518801	1,683204	7,202005	5,433625	1,768380
50	6,712176	5,055740	1,654779	6,712176	4,977500	1,734677
60	5,837593	4,251999	1,585594	5,837593	4,183801	1,653792
70	5,097171	3,585915	1,511256	5,097171	3,529155	1,568016
80	4,474461	3,036007	1,438454	4,474461	2,989500	1,484961
90	3,950696	2,580804	1,369893	3,950696	2,543140	1,407556
100	3,508617	2,202170	1,306448	3,508617	2,172001	1,336617
150	2,095248	1,035581	1,059667	2,095248	1,028351	1,066897
200	1,383431	0,488447	0,894984	1,383431	0,491151	0,892280
300	0,729147	0,039008	0,639007	0,729147	0,048457	0,680690
400	0,448646	-0,117887	0,566533	0,448646	-0,107091	0,555737
500	0,303510	-0,179477	0,482987	0,303510	-0,168794	0,472304
600	0,218872	-0,200116	0,422333	0,218872	-0,192396	0,412196



Tabela 3.20: Energias em função do raio para  $z_i = L/2$  e potencial  $V_0 = 23,34R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{\AA})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	23,323907	23,323632	0,000275	23,323907	23,323300	0,000608
5	22,916678	22,600984	0,315694	22,916678	22,550609	0,366069
10	21,765688	20,381692	1,383996	21,765688	20,271774	1,493914
15	20,166964	18,242121	1,924843	20,166964	18,109996	2,056969
20	18,395514	16,342439	2,053076	18,395514	16,199970	2,195544
25	16,639609	14,587288	2,052321	16,639609	14,445204	2,194406
30	14,999666	12,989047	2,010619	14,999666	12,854173	2,145493
35	13,516516	11,563257	1,953258	13,516516	11,438887	2,077628
40	12,197748	10,307373	1,890375	12,197748	10,194624	2,003124
45	11,034840	9,208000	1,826839	11,034840	9,106814	1,928026
50	10,022711	8,247680	1,765051	10,012711	8,157422	1,855289
60	8,324293	6,673986	1,650380	8,324293	6,602882	1,721411
70	7,010407	5,461673	1,548734	7,010407	5,406061	1,604346
80	5,975268	4,515891	1,459377	5,975268	4,472635	1,502634
90	5,148575	3,768004	1,380572	5,148575	3,734596	1,413979
100	4,479516	3,168824	1,310692	4,479516	3,143307	1,336209
150	2,500186	1,446258	1,053929	2,500186	1,442884	1,057302
200	1,589610	0,700755	0,888854	1,589610	0,706126	0,883483
300	0,804022	0,118331	0,685690	0,804022	0,129139	0,674883
400	0,483870	-0,079477	0,563347	0,483870	-0,067894	0,551763
500	0,322816	-0,157781	0,480597	0,322816	-0,146597	0,469413
600	0,230579	-0,189888	0,420466	0,230579	-0,179407	0,409986

Tabela 3.21: Energias em função do raio para  $z_i = L/2$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{\AA})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	36,416403	36,414005	0,002398	36,416403	36,414317	0,003086
5	35,346589	34,619660	0,726929	35,346589	34,523846	0,822744
10	32,521851	30,471590	2,050261	32,521851	30,308817	2,213034
15	28,986952	26,665002	2,321950	28,986952	26,480626	2,506326
20	25,465653	23,171557	2,294095	25,465653	22,988146	2,477507
25	22,284456	20,073337	2,211119	22,284456	19,902960	2,381496
30	19,530630	17,413061	2,117568	19,530630	17,259918	2,270711
35	17,187573	15,161770	2,025802	17,187573	15,026269	2,161303
40	15,204095	13,264278	1,939817	15,204095	13,145274	2,058821
45	13,523509	11,662920	1,860589	13,523509	11,558747	1,964762
50	12,094143	10,306167	1,787976	12,094143	10,215094	1,879049
60	9,821542	8,161173	1,660368	9,821542	8,091610	1,729932
70	8,122772	6,570562	1,552211	8,122772	6,517439	1,605334
80	6,824292	5,364923	1,459369	6,824292	5,324458	1,499834
90	5,811455	4,432766	1,378689	5,811455	4,402155	1,409299
100	5,007105	3,699297	1,307808	5,007105	3,676450	1,330655
150	2,707702	1,657357	1,050345	2,707702	1,655735	1,051967
200	1,691866	0,805947	0,885919	1,691866	0,812453	0,879413
300	0,839823	0,156042	0,683780	0,839823	0,167404	0,672418
400	0,500372	-0,061635	0,562007	0,500372	-0,049734	0,551060
500	0,331743	-0,147853	0,479596	0,331743	-0,136466	0,468209
600	0,235942	-0,183741	0,419684	0,235942	-0,173123	0,409065

Após ter representado graficamente o comportamento da energia de ligação para o poço quântico com alturas de barreiras de potencial finito, será apresentado abaixo o comportamento da energia de ligação normalizada em seu valor máximo para a impureza com posição variando de  $z_i = 0$  até  $z_i = L/2$  com diferentes alturas de barreiras de potencial  $V_0$ .

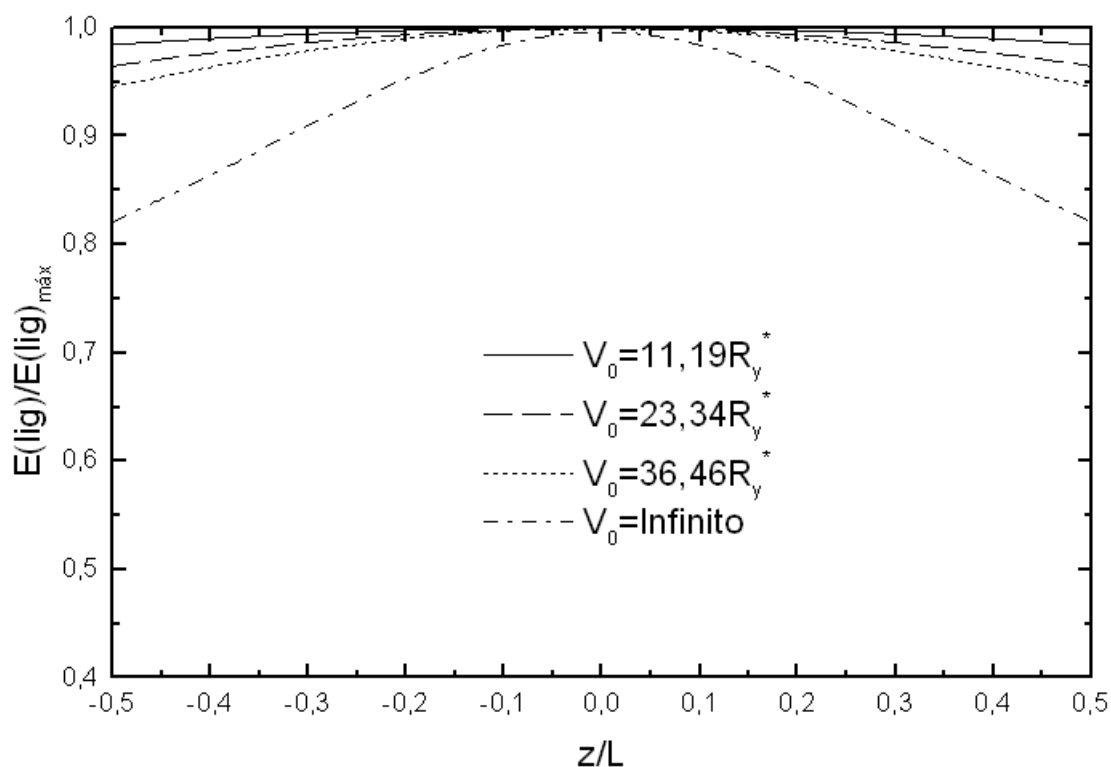


Figura 3.19: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 20\text{\AA}$  referente a função I.

A Figura 3.19 representa o comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barreiras de potencial e largura  $L = 20\text{\AA}$  obtida pela primeira função de onda escolhida como tentativa. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço e que, quando a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, e isto deve ocorrer até que seu comportamento tenda para o poço com barreiras de potencial infinito.

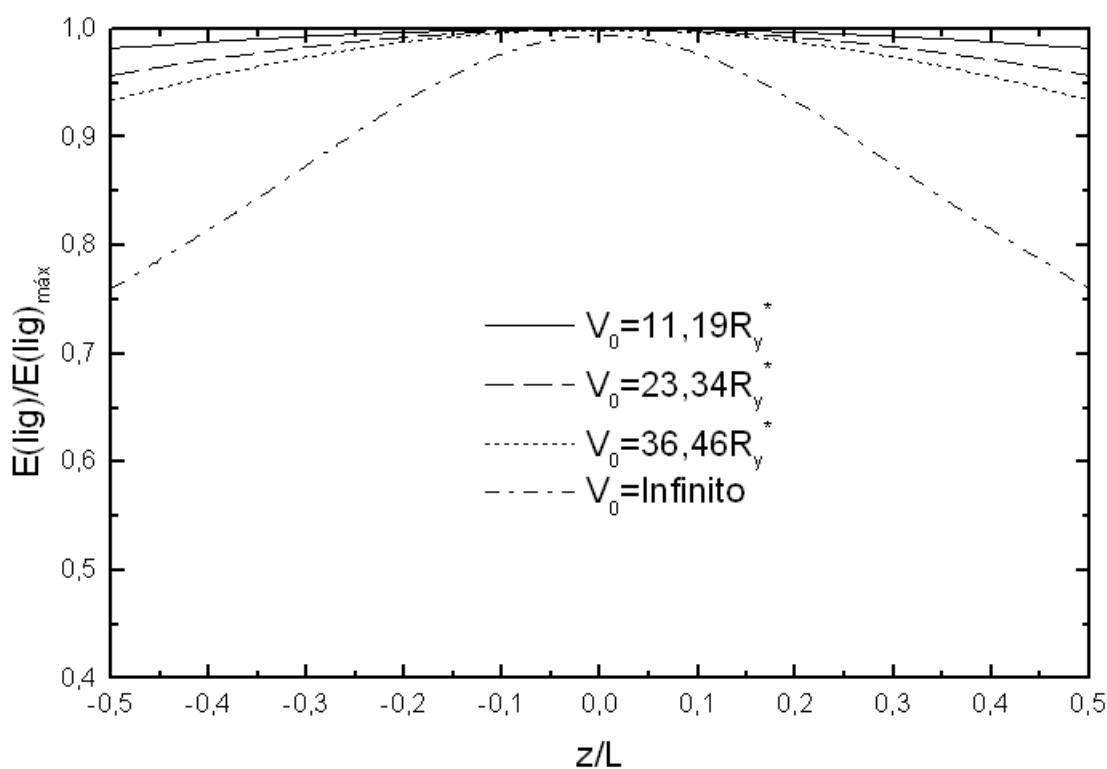


Figura 3.20: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{lig,max}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 20\text{\AA}$  referente a função II.

O comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{lig,max}$  em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barreiras de potencial e largura  $L = 20\text{\AA}$  pode ser representada pela Figura 3.20 de acordo com os resultados obtidos pela segunda função de onda tentativa. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço e que, quando a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, assim como foi observado na Figura 3.19 obtidos com a primeira função de onda tentativa, porém nota-se que o comportamento para a energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{lig,max}$  se apresentou melhor para a segunda função de onda tentativa, pois as energias de ligações foram maiores que as obtidas pela primeira função, como pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.22, 3.23, 3.24, 3.25, 3.26 e 3.27 a seguir.

Tabela 3.22: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	8,469614	1,489944	1	742100
2	8,470571	1,488988	0,9993	105,59368
4	8,473424	1,486134	0,9974	52,662977
6	8,478122	1,481436	0,9943	35,716806
8	8,484578	1,474980	0,9899	27,400034
10	8,492677	1,466881	0,9845	22,534265

Tabela 3.23: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	8,382906	1,576652	1	1054371,3
2	8,384111	1,575448	0,9992	84,321609
4	8,387701	1,571858	0,9969	41,825356
6	8,393600	1,565958	0,9932	28,459640
8	8,401685	1,557874	0,9881	21,918541
10	8,411787	1,547772	0,9817	18,106747

Tabela 3.24: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23, 34R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	16,267016	2,128498	1	202127
2	16,270245	2,125260	0,9984	31,302927
4	16,279822	2,115693	0,9939	15,760740
6	16,295420	2,100095	0,9866	10,831050
8	16,316517	2,078997	0,9767	8,462455
10	16,342439	2,053076	0,9646	7,122942

Tabela 3.25: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23, 34R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	16,102239	2,293275	1	234312,5
2	16,106451	2,289064	0,9981	24,106798
4	16,118929	2,276585	0,9927	12,089514
6	16,139211	2,256303	0,9839	8,338624
8	16,166546	2,228968	0,9719	6,545194
10	16,199970	2,195544	0,9574	5,539580

Tabela 3.26: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	23,039745	2,425908	1	108165
2	23,045543	2,420109	0,9976	17,442800
4	23,062658	2,402995	0,9905	8,851903
6	23,090272	2,375381	0,9792	6,154682
8	23,127107	2,338546	0,9639	4,886193
10	23,171557	2,294095	0,9456	4,195350

Tabela 3.27: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 20\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	22,813304	2,652348	1	114634,146
2	22,821054	2,644599	0,9971	13,104878
4	22,843902	2,621751	0,9885	6,629668
6	22,880672	2,584981	0,9746	4,628151
8	22,929521	2,536131	0,9562	3,693387
10	22,988146	2,477507	0,9341	3,191278

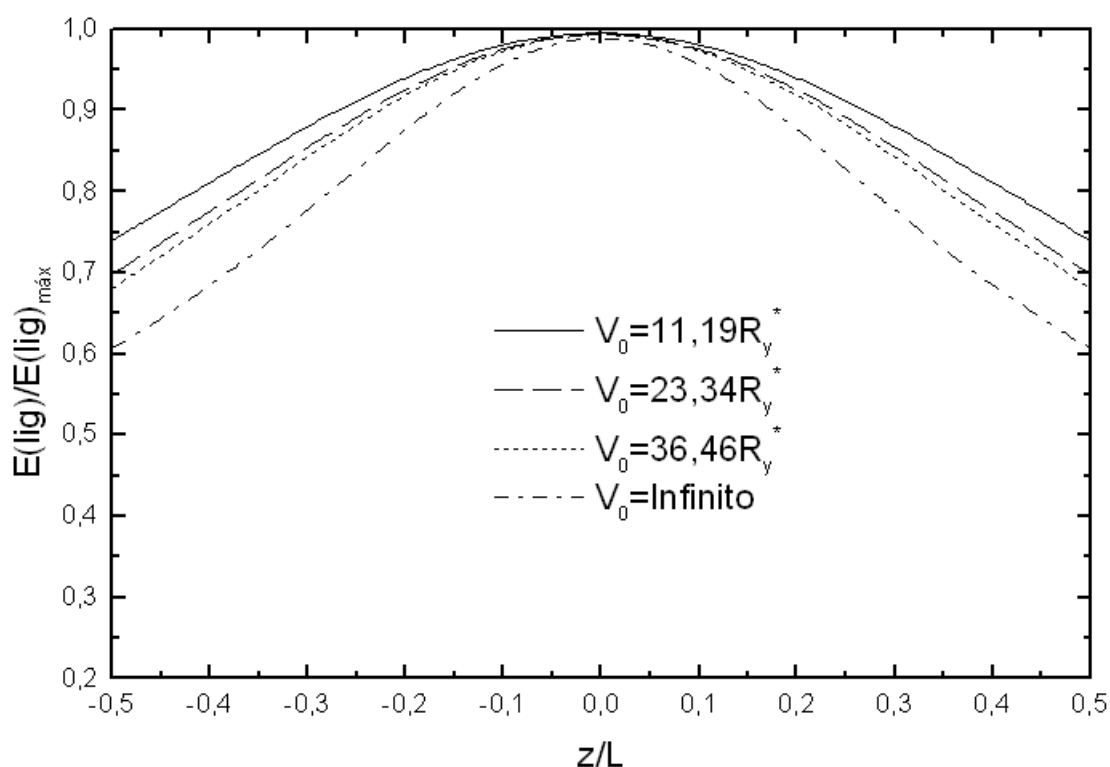


Figura 3.21: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 100\text{\AA}$  referente a função I.

A Figura 3.21 representa o comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barrei-

ras de potencial e largura  $L = 100\text{\AA}$  obtidos com a primeira função de onda escolhida como tentativa. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço e que, quando a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, pois o elétron sente a presença da barreira de potencial e diminui a interação com a impureza, isto pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.28 e 3.29 apresentadas a seguir para uma altura de barreira de potencial de  $V_0 = 36,46R_y^*$ , onde mostra que para a impureza em  $z_i = 0$  e poço como largura  $L = 300\text{\AA}$  o elétron está ligado a impureza, pois apresenta energia  $E$  negativa. No entanto para a impureza localizada na borda do poço  $z_i = L/2$  o elétron só fica ligado a impureza para poços com largura igual ou superiores a  $L = 400\text{\AA}$ .

Tabela 3.28: Energias em função da largura do poço para  $z_i = 0$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{\AA})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	36,416403	36,414004	0,002398	36,416403	36,313316	0,030865
5	35,346589	34,617842	0,728748	35,346589	34,521227	0,825362
10	32,521851	30,447647	2,074203	32,521851	30,276995	2,244856
15	28,986952	26,593309	2,393642	28,986952	26,385210	2,601742
20	25,465653	23,039744	2,425908	25,465653	22,813304	2,652348
25	22,284456	19,880173	2,404283	22,284456	19,648508	2,635948
30	19,530629	17,162624	2,368005	19,530630	16,932848	2,597781
35	17,187573	14,859854	2,327719	17,187573	14,635583	2,551990
40	15,204095	12,916807	2,287288	15,204095	12,699780	2,504315
45	13,523509	11,275366	2,248143	13,523509	11,066315	2,457194
50	12,094143	9,883391	2,210752	12,094143	9,682509	2,411634
60	9,821541	7,680143	2,141398	9,821541	7,495146	2,326396
70	8,122772	6,044181	2,078591	8,122772	5,873795	2,248977
80	6,824292	4,802993	2,021299	6,824292	4,645753	2,178539
90	5,811455	3,842826	1,968628	5,811455	3,697330	2,114125
100	5,007105	3,087224	1,919880	5,007105	2,952215	2,054890
150	2,707702	0,988421	1,719281	2,707702	0,981863	1,815840
200	1,691866	0,124763	1,567027	1,691866	0,052101	1,639765
300	0,839823	-0,506348	1,346171	0,839823	-0,551762	1,391585
400	0,500372	-0,690050	1,190422	0,500372	-0,720885	1,221257
500	0,331742	-0,741351	1,073094	0,331742	-0,763394	1,095137
600	0,235942	-0,744783	0,980726	0,235942	-0,761091	0,997033

Tabela 3.29: Energias em função do raio para  $z_i = L/2$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com as funções I e II.

$L(\text{\AA})$	$E_{SI}$ para $\psi_I$	$E(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_I$	$E_{SI}$ para $\psi_{II}$	$E(R_y^*)$ para $\psi_{II}$	$E_{lig}(R_y^*)$ para $\psi_{II}$
1	36,416403	36,414005	0,002398	36,416403	36,414317	0,003086
5	35,346589	34,619660	0,726929	35,346589	34,523846	0,822744
10	32,521851	30,471590	2,050261	32,521851	30,308817	2,213034
15	28,986952	26,665002	2,321950	28,986952	26,480626	2,506326
20	25,465653	23,171557	2,294095	25,465653	22,988146	2,477507
25	22,284456	20,073337	2,211119	22,284456	19,902960	2,381496
30	19,530630	17,413061	2,117568	19,530630	17,259918	2,270711
35	17,187573	15,161770	2,025802	17,187573	15,026269	2,161303
40	15,204095	13,264278	1,939817	15,204095	13,145274	2,058821
45	13,523509	11,662920	1,860589	13,523509	11,558747	1,964762
50	12,094143	10,306167	1,787976	12,094143	10,215094	1,879049
60	9,821542	8,161173	1,660368	9,821542	8,091610	1,729932
70	8,122772	6,570562	1,552211	8,122772	6,517439	1,605334
80	6,824292	5,364923	1,459369	6,824292	5,324458	1,499834
90	5,811455	4,432766	1,378689	5,811455	4,402155	1,409299
100	5,007105	3,699297	1,307808	5,007105	3,676450	1,330655
150	2,707702	1,657357	1,050345	2,707702	1,655735	1,051967
200	1,691866	0,805947	0,885919	1,691866	0,812453	0,879413
300	0,839823	0,156042	0,683780	0,839823	0,167404	0,672418
400	0,500372	-0,061635	0,562007	0,500372	-0,049734	0,551060
500	0,331743	-0,147853	0,479596	0,331743	-0,136466	0,468209
600	0,235942	-0,183741	0,419684	0,235942	-0,173123	0,409065



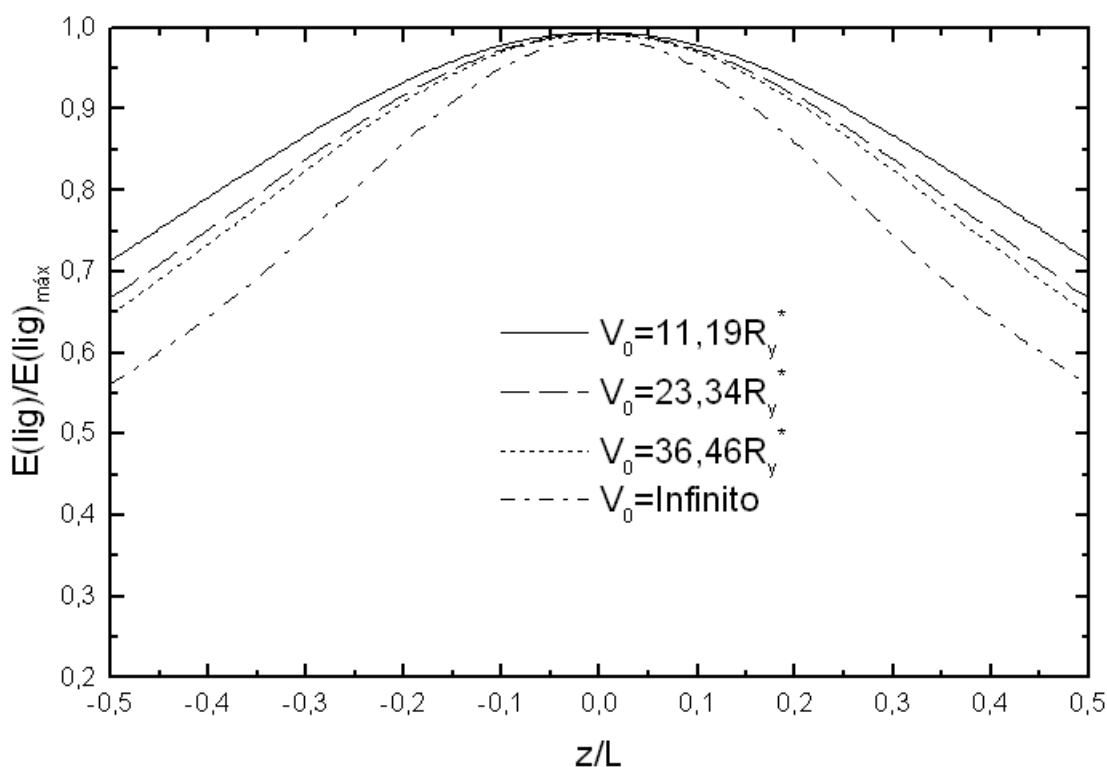


Figura 3.22: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 100\text{\AA}$  referente a função II.

O comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barreiras de potencial e largura  $L = 100\text{\AA}$  pode ser observado pela Figura 3.22 obtidas com a segunda função de onda escolhida como tentativa. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço e que, quando a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, no entanto o comportamento da curva da energia de ligação normalizada para o poço com barreiras de potencial finito deve tender para o caso do poço com altura de barreira de potencial infinito a medida que se aumenta a concentração de alumínio na liga de  $Al_xGa_{1-x}As$ , assim como foi apresentado pela primeira função de onda escolhida como tentativa, porém o comportamento da curva no gráfico para a energia de ligação normalizada foi melhor para a segunda função de onda escolhida como tentativa, pois apresentaram maiores valores para energia de ligação  $E_{Lig}$  conforme pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.30, 3.31, 3.32, 3.33, 3.34 e 3.35 a seguir.

Tabela 3.30: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	1,742557	1,766060	1	60589,3
10	1,769226	1,739392	0,9849	4,099252
20	1,843845	1,664773	0,9426	1,992495
30	1,952535	1,556082	0,8811	1,634842
40	2,077206	1,431412	0,8105	1,576528
50	2,202170	1,306448	0,7397	1,653043

Tabela 3.31: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	1,636640	1,871978	1	23197,39
10	1,667816	1,840801	0,9833	3,691106
20	1,755086	1,753532	0,9367	1,637783
30	1,882319	1,626298	0,8688	1,378536
40	2,027610	1,481007	0,7911	1,358810
50	2,172001	1,336617	0,7140	1,440623

Tabela 3.32: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23, 34R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	2,603118	1,876398	1	49395,7
10	2,638790	1,840726	0,9809	3,066710
20	2,736780	1,742736	0,9288	1,545557
30	2,874603	1,604913	0,8553	1,320564
40	3,025452	1,454064	0,7749	1,337215
50	3,168824	1,310692	0,6985	1,480778

Tabela 3.33: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23, 34R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	2,477287	2,002229	1	18476,389
10	2,519566	1,959950	0,9789	2,711710
20	2,635741	1,843776	0,9208	1,258259
30	2,799113	1,680403	0,8393	1,102835
40	2,976708	1,502808	0,7506	1,142901
50	3,143308	1,336209	0,6674	1,287011

Tabela 3.34: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	3,087224	1,919880	1	45580,7
10	3,127452	1,879653	0,9790	2,721422
20	3,236891	1,770214	0,9220	1,396936
30	3,388050	1,619054	0,8433	1,218847
40	3,549629	1,457476	0,7591	1,264603
50	3,699297	1,307808	0,6812	1,436749

Tabela 3.35: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 100\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$gLE_{lig}$
0	2,952215	2,054890	1	16860,058
10	3,000238	2,006867	0,9766	2,384514
20	3,130896	1,876208	0,9130	1,131551
30	3,311185	1,695920	0,8253	1,013252
40	3,502259	1,504846	0,7323	1,0773612
50	3,676459	1,330655	0,6476	1,248971

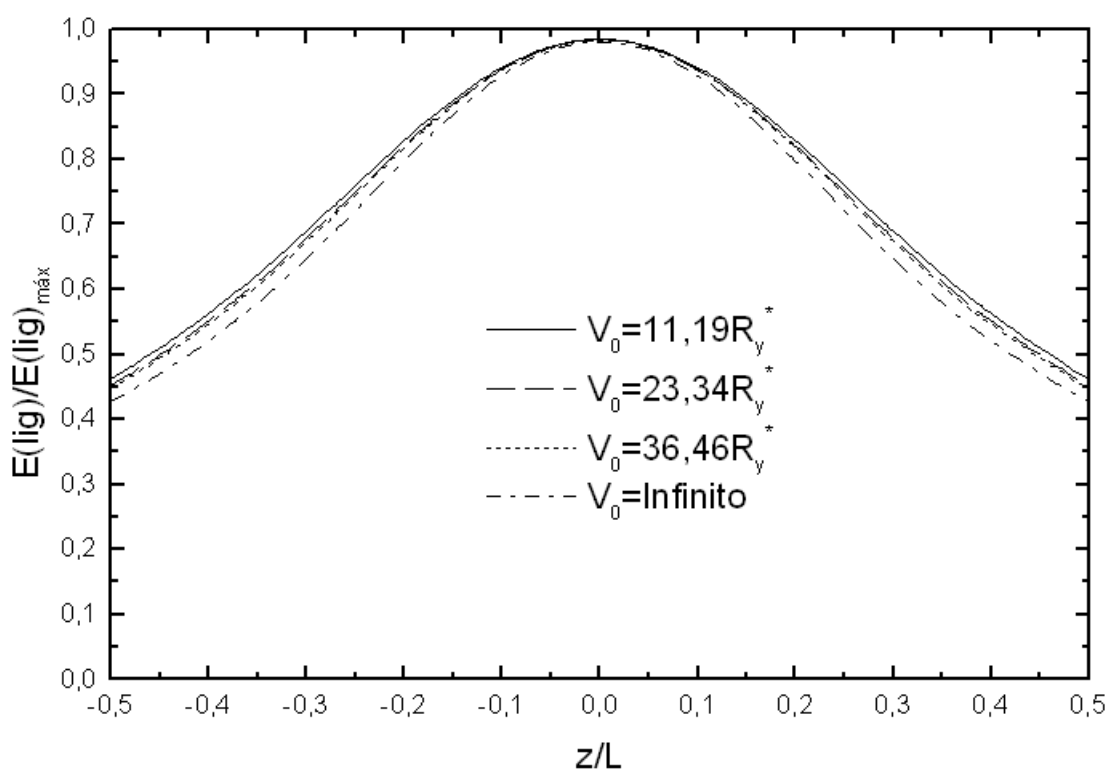


Figura 3.23: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 500\text{\AA}$  referente a função I.

A Figura 3.23 representa o comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barreiras

de potencial e largura  $L = 500\text{\AA}$  obtidos com a primeira função de onda escolhida como tentativa. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço e que, quando a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, porém o comportamento da curva próximo da posição  $z_i = 0$  não está de acordo com (BASTARD, 1981), pois os valores obtidos para a energia de ligação normalizada nesta região deveria diminuir pouco para uma distância de até  $100\text{\AA}$  da posição  $z_i = 0$ , isto ocorre porque as formas das funções de ondas tentativas não foram boas para poços muito largos e com a falta de uma dependência com a variável  $z$  na exponencial a energia de ligação  $E_{Lig}$  diminui rapidamente próximo da posição  $z_i = 0$ , porém tende para os valores obtidos por (BASTARD, 1981) nas bordas do poço.

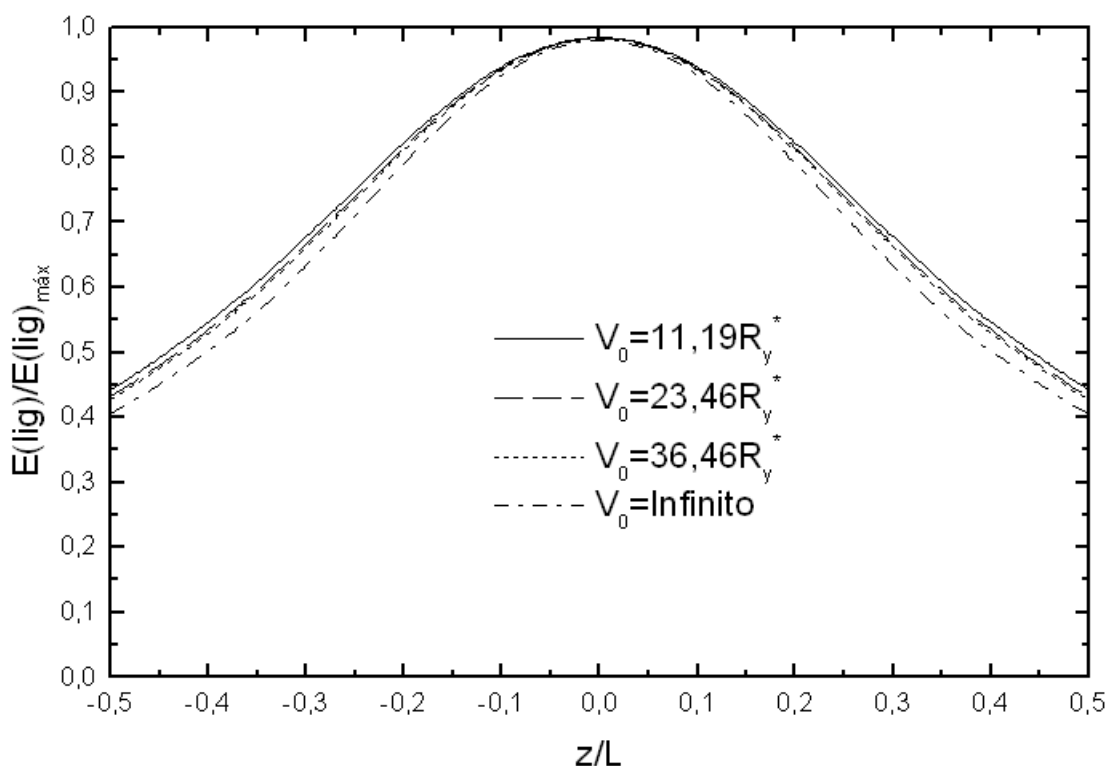


Figura 3.24: Energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para diferentes alturas potencial e  $L = 500\text{\AA}$  referente a função II.

O comportamento da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  obtidas com a segunda função de onda escolhida como tentativa em função da posição da impureza dentro do poço quântico com diferentes alturas de barreiras de potencial e largura  $L = 500\text{\AA}$  pode ser observado pela Figura 3.24. Observa-se que a energia de ligação é máxima no centro do poço, e a medida que a impureza se desloca para a borda do poço seu valor diminui de tal forma que, quanto maior for a altura da barreira de potencial menor será a energia de ligação, porém o comportamento da curva próximo da posição  $z_i = 0$  não está de acordo com (BASTARD, 1981) como foi também observado com a primeira função tentativa, no entanto nos limites do poço os valores obtidos

para a energia de ligação se apresentou melhor para a segunda função de onda tentativa, e isto pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.36, 3.37, 3.38, 3.39, 3.40 e 3.41 a seguir.

Tabela 3.36: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$g_L E_{lig}$
0	-0,744491	1,048002	1	78022,9
50	-0,695175	0,998685	0,9529	2,329158
100	-0,569049	0,872559	0,8326	1,256903
150	-0,415810	0,719320	0,6864	1,311929
200	-0,280252	0,583762	0,5570	1,696300
250	-0,179477	0,482987	0,4609	2,389673

Tabela 3.37: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 11, 19R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$g_L E_{lig}$
0	-0,764927	1,068437	1	35543,63
50	-0,713312	1,016822	0,9517	2,418758
100	-0,580568	0,884078	0,8275	1,129609
150	-0,417923	0,721433	0,6752	1,217122
200	-0,274131	0,577640	0,5406	1,616051
250	-0,168794	0,472304	0,4421	2,321594

Tabela 3.38: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23, 34R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{lig}max$	$g_L E_{lig}$
0	-0,742624	1,065440	1	74288,9
50	-0,689725	1,012541	0,9503	2,172460
100	-0,555787	0,878603	0,8246	1,195676
150	-0,396126	0,718942	0,6748	1,275617
200	-0,258191	0,581007	0,5453	1,686116
250	-0,157781	0,480597	0,4511	2,416371

Tabela 3.39: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 23,34R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	-0,764166	1,086982	1	33751,135
50	-0,708704	1,031519	0,9489	2,246327
100	-0,567457	0,890273	0,8190	1,074320
150	-0,397682	0,720498	0,6628	1,182737
200	-0,251288	0,574104	0,5282	1,606563
250	-0,146597	0,469412	0,4318	2,357284

Tabela 3.40: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a primeira função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	-0,741351	1,073094	1	72719,1
50	-0,686804	1,018547	0,9492	2,107400
100	-0,549330	0,881073	0,8211	1,170034
150	-0,386876	0,718619	0,6697	1,261106
200	-0,248017	0,579760	0,5403	1,683360
250	-0,147853	0,479596	0,4469	2,429532

Tabela 3.41: Energias e densidades de estados de impurezas para  $L = 500\text{\AA}$  e potencial  $V_0 = 36,46R_y^*$  obtidas com a segunda função.

$z_i$	$E(R_y^*)$	$E_{lig}(R_y^*)$	$E_{lig}/E_{ligmax}$	$g_L E_{lig}$
0	-0,763394	1,095137	1	32997,392
50	-0,706158	1,037901	0,9477	2,174879
100	-0,561052	0,892795	0,8152	1,051418
150	-0,388166	0,719909	0,6574	1,169017
200	-0,240768	0,572511	0,5228	1,604284
250	-0,136466	0,468209	0,4275	2,374798

Os resultados obtidos numericamente pela equação

$$g_L(E_{lig}) = \frac{2}{L} \frac{1}{\left| \frac{dE_{lig}}{dz_i} \right|}, \quad (3.85)$$

para a densidade estado  $g_L(E_{lig})$  em função da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$ , para diferentes larguras do poço quântico e várias alturas de barreiras de potencial, está representado graficamente apenas para os valores obtidos com a segunda função de onda escolhida como tentativa, pois seus resultados foram melhores do que os que foram obtidos pela primeira função.

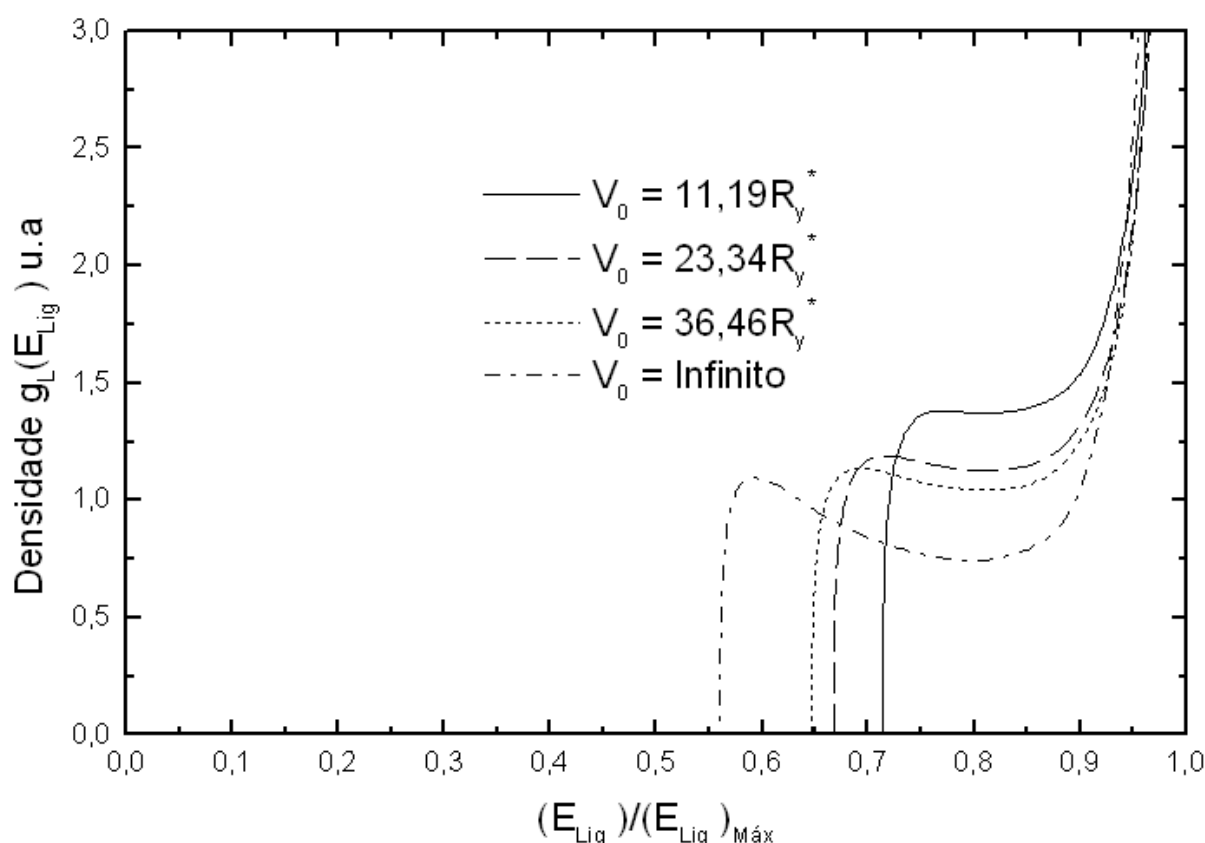


Figura 3.25: Densidade de estados de impureza em função da energia de ligação normalizada  $E_{lig}/E_{ligmax}$  para  $L = 100\text{\AA}$  e diferentes alturas de potencial referente a função II.

A Figura 3.25 representa a densidade de estados de impureza doadora  $g_L(E_{lig})$  em um poço quântico com várias alturas de barreiras de potencial e largura  $L = 100\text{\AA}$  em função da energia de ligação normalizada obtidos com a segunda função de onda tentativa. Pode-se observar que no centro do poço a densidade de estados de impurezas doadoras tende para infinito para qualquer altura da barreira de potencial, no entanto a medida que a impureza se desloca afastando-se de  $z_i = 0$  a densidade de estados diminui abruptamente voltando a aumentar próximo da borda do poço, no entanto quanto maior for a concentração de alumínio na liga de  $Al_xGa_{1-x}As$  a curva característica da densidade de estado  $g_L(E_{lig})$  tende para o caso do poço com altura de barreira de potencial infinito como fez (BASTARD, 1981). Deve-se ressaltar que os resultados obtidos para as densidades de estados não foram de acordo com (BASTARD, 1981) para poços com larguras superiores a  $L = 300\text{\AA}$ , conforme pode ser observado quantitativamente nas tabelas 3.37, 3.39 e 3.41 apresentadas anteriormente, pois a medida que a impureza se desloca de  $z_i = 0$  para  $z_i = L/2$  a densidade de estado de impureza deveria diminuir até atingir um valor mínimo na borda do poço, porém as estruturas de poços quânticos geralmente apresentam largura em torno de no máximo  $300\text{\AA}$  correspondendo ao limite onde os resultados obtidos para as densidades de estados foram satisfatórios, considerando que neste trabalho as funções de ondas escolhidas

---

como tentativa para a aplicação do Método Variacional, foram mais simples que a função de onda escolhida por (BASTARD, 1981) e que mesmo assim dentro de um limite condizente com a realidade das estruturas de poços quânticos os resultados foram compatíveis.



## 4 *Fio Quântico na Presença de Campo Magnético Aplicado*

### 4.1 Cálculo dos Níveis de Energia Para o Fio Quântico

A figura 4.1 representa um fio quântico com barreiras de potencial infinito confeccionado a partir de arseneto de gálio *GaAs*, com campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ . Será considerado um fio muito longo, de forma que a coordenada em  $z$  varie de menos a mais infinito.

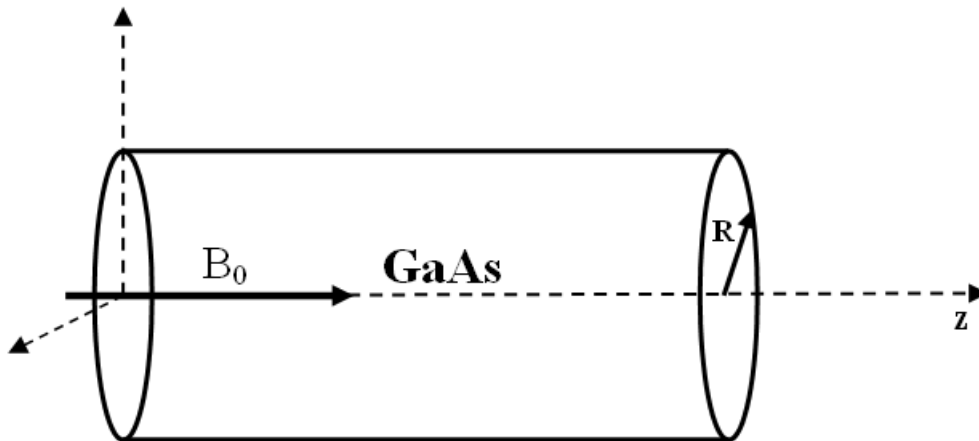


Figura 4.1: Fio quântico com campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ .

Pode-se escrever a energia para um elétron ligado a uma impureza em um fio quântico submetido a um campo magnético  $B_0$  ao longo do eixo  $z$ , pela seguinte Hamiltoniana.

$$H = \frac{1}{2m^*} \left( \mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} + V(\rho) \quad (4.1)$$

Em que  $m^*$  é a massa efetiva do elétron dentro do fio,  $e$  é a carga elétrica do elétron,  $c$  é a velocidade da luz no vácuo,  $\epsilon_0$  é a constante dielétrica estática do meio,  $r$  é o raio vetor que define a posição do elétron em relação a impureza dado por  $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$ ,  $V(\rho)$  é o potencial de confinamento dentro do fio  $\rho < R$ ,  $\mathbf{P}$  é o momento linear do elétron e  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor

magnético que pode ser dado por  $\mathbf{B} = \nabla X \mathbf{A}$ .

Para este problema pode-se considerar que as componentes  $\rho$  e  $z$  do potencial vetor magnético  $\mathbf{A}$  sejam nulas, e que  $A_\phi$  seja igual a  $\frac{1}{2}B_0\rho$  como mostra no apêndice B. Considerando que o fio apresenta barreira de potencial infinito, temos que  $V(\rho) = \infty$  para  $\rho > R$  e  $V(\rho) = 0$  para  $\rho < R$ , então por ser infinito o potencial de confinamento no fio, o elétron ficará confinado em  $\rho < R$ , onde  $V(\rho) = 0$ . Sendo assim pode-se escrever a Hamiltoniana do sistema da seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left( P^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 + 2\frac{e}{c} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} \right) - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \quad (4.2)$$

Multiplicando os termos entre parênteses da expressão 4.2 por  $\frac{1}{2m^*}$  e substituindo o potencial vetor  $\mathbf{A}$  apenas por sua componente em  $\phi$  que é dada por  $\frac{1}{2}B_0\rho$ , obtém-se a seguinte expressão.

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \frac{e^2}{8m^*c^2} B_0^2 \rho^2 + \frac{e^2}{2m^*c} P_\phi B_0 \rho - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \quad (4.3)$$

Chamando  $\frac{eB_0}{m^*c}$  de  $\omega_c$ , e substituindo a componente  $\phi$  do momento linear do elétron dada por  $P_\phi$  por  $-i\hbar\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi}$  e o momento linear do elétron ao quadrado  $P^2$  por  $-\hbar^2\nabla^2$ , em que  $\nabla^2$  é o operador Laplaciano, obtém-se a seguinte expressão:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + \frac{m^*}{8}\omega_c^2\rho^2 - \frac{\omega_c}{2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \quad (4.4)$$

Para escrever a Hamiltoniana 4.4 na forma adimensional, devemos dividir toda expressão pelo Rydberg efetivo, de forma que se possa escrever

$$H = -\nabla^2 + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 - \gamma\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \frac{2}{r}, \quad (4.5)$$

em que  $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2R_y^*}$ .

Para se calcular a energia deve-se resolver a equação de Schroedinger  $H\psi = E\psi$ , a fim de se obter a função de onda  $\psi$ . Devido a geometria do problema o operador laplaciano  $\nabla^2$  será utilizado em coordenadas cilíndricas, sendo assim pode-se escrever a equação de Schroedinger como se segue abaixo:

$$-\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2\psi - \gamma\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\phi}\right) - \frac{2}{r}\psi = E\psi. \quad (4.6)$$

### 4.1.1 Método Variacional e de Perturbação

A equação de Schroedinger dada pela expressão 4.6 é uma equação diferencial parcial de segunda ordem, porém não pode ser resolvida analiticamente pois não possui as variáveis  $\rho$  e  $z$  separáveis, uma vez que  $r$  é dado por  $(\rho^2 + z^2)^{1/2}$ . Para resolver então a equação 4.6 pode-se aplicar o Método Variacional e de Perturbação que consiste em substituir o termo que impossibilita separar as variáveis por outro que permita, neste caso será substituído o termo  $\frac{1}{r}$  da equação 4.6 por  $\frac{\lambda}{z}$ , afim de tornar a equação de Schroedinger com variáveis separáveis, na qual  $\lambda$  é um parâmetro que será determinado posteriormente. Pode-se escrever a função de onda  $\psi$  que é função de  $\rho$ ,  $\phi$  e  $z$ , como sendo o produto das funções  $\chi(\rho)$ ,  $\Phi(\phi)$  e  $Z(z)$ , no entanto como a função de onda é plana em  $z$  pode-se considerar que a dependência da função em  $\phi$  seja escrita por  $e^{im\phi}$ , em que  $m$  é igual a zero por se tratar dos níveis de energias para o estado fundamental, fazendo com que a função em  $\phi$  seja dada por  $\Phi(\phi) = 1$ , porém as funções de  $\rho$  e  $z$  ainda devem ser determinadas. Substituindo a função de onda  $\psi$  pelo produto das funções  $\chi(\rho)$  e  $Z(z)$  em seguida substituindo na equação 4.6, obtém-se após algumas simplificações a expressão abaixo.

$$-\frac{1}{\chi(\rho)} \frac{\partial^2 \chi(\rho)}{\partial^2 \rho} - \frac{1}{\rho \chi(\rho)} \frac{\partial \chi(\rho)}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial^2 z} + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + m\gamma - \frac{2\lambda}{z} = E \quad (4.7)$$

Para simplificar as notações  $\chi(\rho)$ ,  $Z(z)$ ,  $\frac{\partial^2 \chi(\rho)}{\partial^2 \rho}$ ,  $\frac{\partial \chi(\rho)}{\partial \rho}$  e  $\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial^2 z}$  da equação 4.7, serão substituídas respectivamente por:  $\chi$ ,  $Z$ ,  $\chi''$ ,  $\chi'$  e  $Z''$ . Considerando que a energia  $E$  possa ser escrita como sendo a soma das energias  $E_\rho + E_z$  a equação 4.7 pode ser escrita como sendo duas relações para a energia, como segue abaixo:

$$E_\rho = \frac{1}{\chi} \chi'' - \frac{1}{\rho \chi} \chi' + m\gamma + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + \frac{m^2}{\rho^2} \quad (4.8)$$

$$E_z = -\frac{Z''}{Z} - \frac{2\lambda}{z} \quad (4.9)$$

### 4.1.2 Determinação da Função $Z(z)$ .

Será calculado primeiramente a relação 4.9, onde após algumas simplificações pode-se escrever a seguinte expressão:

$$zZ'' + 2\lambda Z + zE_z Z = 0 \quad (4.10)$$

Esta equação é resolvida utilizando uma série de potência (BUTKOV, 1968) como segue abaixo:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n. \quad (4.11)$$

Expandindo esta série fazendo ( $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) e realizando as derivadas de primeira e segunda ordem obtém-se as seguintes expressões:

$$Z = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3 + a_4 z^4 + \dots \quad (4.12)$$

$$Z' = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n z^{n-1} \quad (4.13)$$

$$Z'' = \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) n a_n z^{n-2} \quad (4.14)$$

Substituindo 4.11 e 4.14 em 4.10, pode-se escrever

$$\sum_{n=1}^{\infty} (n-1) n a_n z^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} 2\lambda a_n z^n + \sum_{n=0}^{\infty} E_z a_n z^{n+1} = 0. \quad (4.15)$$

Expandindo-se as séries e comparando os termos que multiplicam a variável  $z$  de mesma potência pode-se escrever as seguintes relações:

$$2\lambda a_0 = 0; \quad (4.16)$$

$$2a_2 + 2\lambda a_1 + E_z a_0 = 0; \quad (4.17)$$

$$6a_3 + 2\lambda a_2 + E_z a_1 = 0; \quad (4.18)$$

$$12a_4 + 2\lambda a_3 + E_z a_2 = 0. \quad (4.19)$$

Como  $\lambda$  é um parâmetro a ser determinado e não pode ser igual a zero devido a condição feita anteriormente, onde foi considerado  $\frac{1}{r} = \frac{\lambda}{z}$ , logo deve-se fazer  $a_0 = 0$ , no entanto pode-se determinar as constantes  $a_2$ ,  $a_3$  e  $a_4$  em função de  $a_1$ , em que  $a_1 \neq 0$ , sendo assim ao substituir os termos das equações 4.17, 4.18 e 4.19 em função de  $a_1$ , na equação 4.12, pode-se obter uma expressão para a função de onda em  $z$  dada por:

$$Z = a_1 z - \lambda a_1 z^2 + \frac{2\lambda^2 - E_z}{6} a_1 z^3 + \frac{-2\lambda^3 + 4E_z \lambda}{36} a_1 z^4 + \dots \quad (4.20)$$

Se colocar a variável  $z$  e a constante  $a_1$  da equação 4.20 em evidência, pode-se escrever a seguinte expressão

$$Z = a_1 z \left[ 1 - \lambda z + \frac{2\lambda^2 - E_z}{6} z^2 + \frac{-2\lambda^3 + 4E_z \lambda}{36} z^3 + \dots \right]. \quad (4.21)$$

Geralmente as expansões em série podem apresentar soluções do tipo: seno, cosseno ou exponencial, e como a função de onda que se está determinando deve apresentar um comportamento finito, será considerado que a relação entre  $E_z$  e  $\lambda$  seja dada por  $E_z = -\lambda^2$ , de tal forma que a equação 4.21 possa ser escrita como uma expansão em série de uma exponencial como se segue abaixo:

$$Z = a_1 z \left[ 1 - \lambda z + \frac{\lambda^2}{2} z^2 - \frac{\lambda^3}{6} z^3 + \dots \right]. \quad (4.22)$$

Sendo assim a solução da função em  $z$  pode ser representada pela seguinte equação:

$$Z = a_1 z e^{-\lambda|z|}. \quad (4.23)$$

### 4.1.3 Determinação da Função $\chi(\rho)$ .

Para resolver a equação 4.8, primeiramente serão feitas algumas simplificações, na qual deve-se fazer a equação igual a zero e multiplicá-la por  $\chi$ , sendo assim pode-se escrever a seguinte expressão:

$$\chi'' + \frac{\chi'}{\rho} \left( E_\rho - \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 - m\gamma \right) \chi = 0 \quad (4.24)$$

Após as simplificações devidas será feita uma mudança de variável como se segue abaixo:

$$\xi = \frac{\gamma}{2} \rho^2 \implies \rho = \left( \frac{2\xi}{\gamma} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.25)$$

O desenvolvimento que será feito a seguir é para que se possa substituir as derivadas de  $\chi$  em  $\rho$  da equação 4.24 por derivadas de  $\chi$  em  $\xi$ .

$$\begin{aligned}\frac{\partial \chi}{\partial \rho} &= \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \rho} = \gamma \rho \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \implies \frac{\partial}{\partial \rho} = \gamma \rho \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho^2} &= \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) = \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \gamma \rho \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \right) \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho^2} &= \gamma \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \gamma \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\partial \chi}{\partial \xi} \right) = \gamma \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \left( \gamma^2 \rho^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} \right)\end{aligned}$$

Substituindo as derivadas de primeira e segunda ordem na equação 4.24 obtém-se:

$$\gamma^2 \rho^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + 2\gamma \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \left( E_\rho - \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 - m\gamma \right) \chi = 0. \quad (4.26)$$

Para simplificar a equação 4.26 deve-se multiplicá-la por  $\frac{1}{2\gamma\xi}$ , feito isto pode-se escrever

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \left( \frac{E_\rho}{2\gamma\rho} - \frac{m^2}{2\gamma\rho^2\xi} - \frac{1}{8} \frac{\gamma\rho^2}{\xi} - \frac{m}{2\xi} \right) \chi = 0. \quad (4.27)$$

Realizando algumas substituições da equação 4.25 em 4.27 pode-se escrever

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \left( \frac{1}{4} + \frac{E_\rho - m\gamma}{2\gamma\xi} - \frac{1}{4} \frac{m^2}{\xi^2} \right) \chi = 0. \quad (4.28)$$

Para se obter uma expressão mais compacta, uma vez que se tem várias constantes entre parênteses, serão feitas as seguintes substituições:  $\frac{E_\rho - m\gamma}{2\gamma}$  por  $\delta$  e  $\frac{|m|}{2}$  por  $\mu$ , sendo assim a equação 4.28 será escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \chi}{\partial \xi} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\delta}{\xi} - \frac{\mu^2}{\xi^2} \right) \chi = 0, \quad (4.29)$$

pode-se transformar a equação 4.29 em uma de Whittaker (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), de modo que a solução se torne conhecida, mas antes deve-se fazer algumas mudanças de variáveis para que se elimine a primeira derivada. Para isto será chamado  $\chi$  de  $W\xi^{-\frac{1}{2}}$ , em que  $W$  é uma função de  $\xi$ .

$$\frac{\partial \chi}{\partial \xi} = \frac{\partial W}{\partial \xi} \xi^{-\frac{1}{2}} + W \left( -\frac{1}{2} \right) \xi^{-\frac{3}{2}} \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} = \frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} \xi^{-\frac{1}{2}} + \frac{\partial W}{\partial \xi} \left( -\frac{1}{2} \right) \xi^{-\frac{3}{2}} + \frac{\partial W}{\partial \xi} \left( -\frac{1}{2} \right) \xi^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} W \xi^{-\frac{5}{2}} \quad (4.31)$$

Substituindo as equações 4.30 e 4.31 em (4.29) e fazendo  $W\xi^{-\frac{1}{2}} = \chi$ , pode-se obter uma equação da seguinte forma:

$$\frac{1}{\xi^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + \frac{W}{4\xi^2} + \frac{W}{\xi^{\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{4} + \frac{\delta}{\xi} - \frac{\mu^2}{\xi^2} \right) = 0. \quad (4.32)$$

Multiplicando a equação 4.32 por  $\xi^{\frac{1}{2}}$  e colocando alguns termos em evidência obtém-se finalmente uma equação de Whittaker com se segue abaixo:

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \xi^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\delta}{\xi} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{\xi^2} \right) W = 0 \quad (4.33)$$

A solução da equação 4.33 é satisfeita pela função:

$$W(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{(\mu+1)/2} M \left( \mu - \delta + \frac{1}{2}, 2\mu + 1, \xi \right). \quad (4.34)$$

Desta forma deve-se retornar às variáveis iniciais, e obter uma solução para a função em  $\rho$ , sendo assim a solução da função de onda em  $\rho$  pode ser escrita por

$$\chi(\rho) = De^{\left(-\frac{\gamma\rho^2}{4}\right)} \left( \frac{\gamma\rho^2}{2} \right)^{\frac{|m|}{2}} M \left( a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2} \right), \quad (4.35)$$

em que  $a = \frac{|m|}{2} - \frac{E\rho}{2\gamma} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}$ ,  $b = |m| + 1$  e  $M \left( a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2} \right)$  é a função Hipergeométrica Confluyente (ARFKEN, 1971).

Para se determinar o parâmetro  $\lambda$  acrescentado na equação anteriormente, deve-se utilizar uma expressão que transforma um problema tridimensional em um unidimensional. Para isto será feito o uso da seguinte operação

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \left\langle \frac{\lambda}{z} \right\rangle. \quad (4.36)$$

A função de onda para este problema é dada por  $\psi(\rho, \phi, z) = e^{im\phi} \chi(\rho)Z(z)$ , em que  $\chi(\rho)$  e  $Z(z)$  foram determinadas anteriormente nas equações 4.35 e 4.23 respectivamente. Antes de determinar o parâmetro  $\lambda$ , é bom ressaltar que  $\gamma$  está definido na seção 4.5 como sendo uma constante dependente da intensidade do campo magnético aplicado, então substituindo a função de onda no operador 4.36, pode-se escrever a seguinte expressão:

$$\left\langle \psi(\rho, \phi, z) \left| \frac{1}{r} \right| \psi(\rho, \phi, z) \right\rangle = \left\langle \psi(\rho, \phi, z) \left| \frac{\lambda}{z} \right| \psi(\rho, \phi, z) \right\rangle \quad (4.37)$$

Para resolver a equação 4.37 deve-se substituir o formalismo de Dirac da equação pela forma de integral, sendo assim pode-se obter a seguinte relação:

$$\begin{aligned} D^2 a_1^2 \int_0^R \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z^2 e^{-2\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)}{[\rho^2 + z^2]} \rho d\rho dz = \\ \lambda D^2 a_1^2 \int_0^R \int_{-\infty}^{\infty} z e^{-2\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right) \rho d\rho dz \end{aligned} \quad (4.38)$$

Na expressão 4.38,  $D$  é a constante de normalização da função  $\chi(\rho)$ , que será obtida posteriormente. Para se resolver o membro direito deve-se escrever os limites da integral em  $z$ , como sendo duas vezes de zero a infinito. Assim pode-se escrever a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} 2D^2 a_1^2 \int_0^R \int_0^{\infty} \frac{z^2 e^{-2\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)}{[\rho^2 + z^2]} \rho d\rho dz = \\ 2\lambda D^2 a_1^2 \int_0^R \int_0^{\infty} z e^{-2\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right) \rho d\rho dz. \end{aligned} \quad (4.39)$$

A resolução da integral em  $z$  no membro direito é encontrada na tabela de integral (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), de forma que substituindo o resultado da integral e fazendo algumas simplificações obtém-se.

$$\begin{aligned} 2D^2 \int_0^R \int_0^{\infty} \frac{z^2 e^{-2\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)}{[\rho^2 + z^2]} \rho d\rho dz = \\ \frac{D^2}{2\lambda} \int_0^R e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right) \rho d\rho \end{aligned} \quad (4.40)$$

Multiplicando toda expressão 4.40 por  $2\lambda$ , a integral do membro direito se torna igual a 1(um), por se tratar da normalização da função em  $\rho$ , sendo assim após estas simplificações a expressão 4.40 pode ser escrita como

$$4\lambda D^2 \int_0^R \int_0^{\infty} \frac{z^2 e^{-\lambda|z|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} \left(\frac{\gamma\rho^2}{2}\right)^{|m|} M^2\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)}{[\rho^2 + z^2]} \rho d\rho dz = 1. \quad (4.41)$$

Antes de determinar  $\lambda$  será obtido a constante de normalização  $D$ , para isto será resolvida



a integral do produto da função  $\chi(\rho)$  pelo seu conjugado, que após resolvida pode ser escrita como:

$$D^2 = \frac{\gamma^{|m|}}{2^{|m|}} \int_0^R \rho^{2|m|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} M^2 \left( a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2} \right) \rho d\rho. \quad (4.42)$$

A partir da expressão 4.41 será utilizado um método numérico para que se possa obter os valores de  $\lambda$  em função do raio do fio, porém como foi visto anteriormente fez-se  $E_z$  igual a  $-\lambda^2$  e a energia do elétron  $E$  foi escrita como sendo a soma de  $E_z + E_\rho$ . Para determinar  $E_\rho$ , deve-se considerar  $\chi(\rho)$  igual a zero nas paredes do fio, de maneira que a função  $M \left( a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2} \right)$  também se torne igual a zero, sendo assim o valor de  $\frac{E_\rho}{2\gamma}$  que possa satisfazer esta condição pode ser obtido numericamente. Feito isto os valores de  $E_\rho$  podem ser obtidos para cada intensidade de campo magnético aplicado de forma que o comportamento da energia em função do raio do fio será representada em um gráfico posteriormente.

## 4.2 Níveis de Energias pelo Método Variacional

Para melhor comparar os resultados anteriores com os que serão obtidos utilizando o Método Variacional, serão propostas duas funções de ondas, ambas com forma Gaussiana e ou Hidrogenóide, sendo uma dependente de uma função de Bessel e a outra dependente de uma Hipergeométrica Confluente. Nas funções propostas serão apresentadas constantes variacionais que deverão ser determinadas posteriormente. A Hamiltoniana para o sistema é a mesma do Método Variacional e de Perturbação.

### 4.2.1 Primeira Função de Onda Escolhida Como Tentativa

Como primeira função de onda escolhida será utilizada uma função de onda que dependa de uma função Bessel como mostra a expressão abaixo:

$$\psi(\rho, \phi, z) = N_1 e^{im\phi} e^{-\frac{\beta z^2}{2}} e^{-\frac{\alpha\rho^2}{2}} J_m(k\rho) \quad (4.43)$$

Em que  $\beta$  e  $\alpha$  são constantes variacionais e  $J_m(k\rho)$  é uma função de Bessel (BUTKOV, 1968). Para se determinar a energia utilizando o Método Variacional será determinada primeiramente a constante de normalização  $N_1$ , através da expressão 4.44, porém para simplificar a notação será substituído  $\psi(\rho, \phi, z)$  apenas por  $\psi_1$ .

$$\int_v \psi_1^* \psi_1 dv = 1 \quad (4.44)$$

Substituindo a função de onda  $\psi_1$  na expressão 4.44 e seus limites de integração, obtém-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^R N_1^2 e^{-\alpha\rho^2} J_m^2(k\rho) e^{-\beta z^2} \rho d\rho d\theta dz = 1. \quad (4.45)$$

A integral em  $\phi$  tem como solução seu limite superior e a integral em  $z$  tem solução trivial e pode ser encontrada na tabela de integrais do livro (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968). Após as devidas substituições pode-se escrever a seguinte expressão:

$$2\pi N_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \int_0^R e^{-\alpha\rho^2} J_m^2(k\rho) \rho d\rho = 1. \quad (4.46)$$

Simplificando alguns termos, e chamando a integral em  $\rho$  de  $\delta$ , pode-se escrever o quadrado da constante de normalização por

$$N_1^2 = \frac{1}{\delta 2\pi \sqrt{\pi/\beta}}. \quad (4.47)$$

A integral em  $\rho$  será resolvida utilizando o método numérico, no entanto agora deve-se determinar uma relação para energia do sistema, para isto deve-se resolver a seguinte expressão:

$$E = \int_v \psi_1^* H \psi_1 dv. \quad (4.48)$$

Como o operador Hamiltoniano deste sistema é o mesmo aplicado anteriormente no Método Variacional e de Perturbação, deve-se resolver a expressão abaixo:

$$\nabla^2 \psi_1 = \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \left( \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi_1 \quad (4.49)$$

Antes de aplicar o operador na função de onda, deve-se escrever a função de onda  $\psi_1$  como sendo o produto de três funções, em que  $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$ ,  $Z(z) = e^{-\frac{\beta z^2}{2}}$  e  $F(\rho) = e^{-\frac{\alpha \rho^2}{2}} J_m^2(k\rho)$ . Substituindo estas funções na 4.49 e após algumas simplificações pode-se escrever

$$\nabla^2 \psi_1 = \Phi(\phi) Z(z) \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right) F(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2} \Phi(\phi) Z(z) F(\rho) + \Phi(\phi) F(\rho) \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}. \quad (4.50)$$

Ao realizar a segunda derivada na função  $Z(z)$  obtém-se

$$\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = (-\beta + \beta^2 z^2) Z(z), \quad (4.51)$$

no entanto para determinar a derivada da função  $F(\rho)$ ,  $\Phi(\phi)Z(z) \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right) F(\rho)$  será chamado de  $\Gamma$  para simplificar a notação, no entanto deve-se fazer ainda o uso das seguintes derivadas da função de Bessel encontradas em tabela (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968).

$$J'_m(k\rho) = \frac{k}{2} (J_{m-1}(k\rho) - J_{m+1}(k\rho)) \quad (4.52)$$

$$k\rho J'_m(k\rho) = \rho k^2 J_{m-1}(k\rho) - mk J_m(k\rho) \quad (4.53)$$

$$J_{m-1}(k\rho) = \frac{2m}{k\rho} J_m(k\rho) - J_{m+1}(k\rho) \quad (4.54)$$

Após se aplicar as devidas derivadas e substituir as expressões 4.54, 4.53 e 4.52, obtém-se uma solução para derivada da função em  $\rho$  como se segue abaixo:

$$\begin{aligned} \Gamma = \Phi(\phi)Z(z) \{ & (-2\alpha + \alpha^2 \rho^2) e^{-\frac{\alpha \rho^2}{2}} J_m(k\rho) - e^{-\frac{\alpha \rho^2}{2}} \left[ \frac{k}{2} \alpha \rho (J_{m-1}(k\rho) - J_{m+1}(k\rho)) + \right. \\ & \left. \frac{mk}{2\rho} (J_{m-1}(k\rho) - J_{m+1}(k\rho)) - \alpha (m J_m(k\rho) - k\rho J_{m+1}(k\rho)) - k^2 J_m(k\rho) + (m+1) \frac{k}{\rho} J_{m+1}(k\rho) \right] \} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Depois de substituir todos os termos encontrados e realizar algumas simplificações pode-se finalmente escrever o produto do operador Hamiltoniano pela função de onda como sendo

$$\begin{aligned} H\psi_1 = -N_1 [ & (\alpha^2 \rho^2 - 2\alpha - 2m\alpha - \beta - \beta^2 z^2 + k^2) J_m(k\rho) + (2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho}) J_{m+1}(k\rho) ] \zeta \\ & + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \psi_1 + m\gamma \psi_1 - \frac{2}{r} \psi_1, \end{aligned} \quad (4.56)$$

em que  $\zeta$  representa  $e^{\left( im\phi - \frac{\beta z^2}{2} - \frac{\alpha \rho^2}{2} \right)}$ , no entanto multiplicando a equação 4.56 pela função  $\psi_1$  complexada, dada por  $\psi_1^*$ , obtém-se

$$\begin{aligned}
\psi_1^* H \psi_1 = & -N_1^2 \left[ (\alpha^2 \rho^2 - 2\alpha - 2m\alpha - \beta - \beta^2 z^2 + k^2) J_m(k\rho) e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)} \right] \\
& + N_1^2 \left[ \left( 2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho} \right) J_{m+1}(k\rho) J_m(k\rho) + m\gamma J_m^2(k\rho) \right] e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)} \\
& + N_1^2 \left[ \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 - \frac{2}{\sqrt{(z^2 + \rho^2)}} \right] J_m^2(k\rho) e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)}. \tag{4.57}
\end{aligned}$$

Realizando a integral da 4.57 em em todo o espaço de coordenadas cilíndricas pode-se escrever a energia como sendo

$$\begin{aligned}
E = & -2\pi N_1^2 \int_0^R \int_{-\infty}^{\infty} [(\alpha^2 \rho^2 - 2\alpha - 2m\alpha - \beta - \beta^2 z^2 + k^2) J_m^2(k\rho) e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)} \\
& - \left( \left( 2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho} \right) J_{m+1}(k\rho) J_m(k\rho) + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 J_m^2(k\rho) \right) e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)} \\
& - \left( m\gamma - \frac{2}{\sqrt{(z^2 + \rho^2)}} \right) J_m^2(k\rho) e^{(-\beta z^2 - \alpha \rho^2)}] \rho d\rho dz. \tag{4.58}
\end{aligned}$$

Para se determinar as integrais em  $z$ , será utilizado a tabela de integral (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1968), onde obtém-se as seguintes relações

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} z^2 e^{-\beta z^2} dz &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}}; \\
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta z^2} dz &= \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}.
\end{aligned}$$

Substituindo estas relações em 4.58 e colocando alguns termos semelhantes em evidência, pode-se escrever os níveis de energia para o estado fundamental ( $m = 0$ ) em função da soma das energias  $E_{coul} + E_I + E_{II}$  representadas abaixo, na qual a soma será chamada de  $E_{Bessel}$ .

$$E_{coul} = -4\pi N_1^2 \int_0^R J_m^2(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta z^2}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} dz \tag{4.59}$$

$$E_I = 2\pi N_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \int_0^R \left( 2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho} \right) J_{m+1}(k\rho) J_m(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \tag{4.60}$$

$$E_{II} = -2\pi N_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \int_0^R \left( \alpha^2 \rho^2 - 2\alpha + k^2 - \frac{1 - 2\beta^2}{2\beta} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \right) J_m^2(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \tag{4.61}$$

Como é preciso determinar os parâmetros variacionais  $\alpha$  e  $\beta$ , deve-se minimizar a equação da energia em relação aos próprios parâmetros variacionais e assim poder escrever a energia em

função do raio do fio.

### 4.2.2 Segunda Função de onda Escolhida como Tentativa

A segunda função de onda proposta para o Método Variacional, a fim de se calcular os níveis de energia em um fio quântico com campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ , é dependente de uma função Hipergeométrica Confluente (ARFKEN, 1971), no entanto será mantido o mesmo operador Hamiltoniano utilizado para função de onda dependente da função de Bessel.

$$\psi_2 = N_2 e^{im\phi} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} (\gamma\rho^2)^{\frac{|m|}{2}} M(u, v, \mu), \quad (4.62)$$

em que  $N_2$  é a constante de normalização,  $\sigma$  deve ser determinado como o parâmetro variacional,  $m$  deve ser igual a zero por se tratar do estado fundamental de energia e  $M(u, v, \mu)$  é uma função Hipergeométrica Confluente, onde:  $u$  é determinado fazendo  $M(u, v, \mu) = 0$ ,  $v = |m| + 1$  e  $\mu = \gamma\rho^2$ . Para simplificar a função 4.79 e levando em conta a geometria do problema pode-se escrever respectivamente para  $\rho < R$  e  $\rho \geq R$

$$\Phi(\rho, \phi) = N_2 e^{im\phi} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M(u, v, \mu) \quad (4.63)$$

$$\Phi(\rho, \phi) = 0. \quad (4.64)$$

Como as barreiras de potencial do fio pode ser considerado infinito o elétron não consegue escapar da região de confinamento  $\rho < R$ , sendo assim pode-se determinar sua energia através da equação abaixo:

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (4.65)$$

Será aplicado primeiramente o operador Hamiltoniano na função 4.63, mas deve-se ressaltar que  $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$  e que  $\gamma$  tem dependência com o campo magnético aplicado por uma expressão dada na seção 4.15.

$$H\psi_2 = -\nabla^2\psi_2 + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2\psi_2 - i\gamma\frac{\partial\psi_2}{\partial\phi} - \frac{2}{r}\psi_2 \quad (4.66)$$

Como as energia são referentes ao estado fundamental, onde  $m$  é igual a zero, tem-se a função de onda em  $\phi$  igual a 1, portanto a derivada de  $\psi_2$  em termos de  $\phi$  deve ser zero, sendo

assim será aplicado o operador Laplaciano em coordenadas cilíndricas na função de onda, da seguinte forma:

$$-\nabla^2 \psi_2 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial \phi^2} - \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} \quad (4.67)$$

A solução para 4.67 deve ser determinada pela soma das derivadas parciais, mas como foi visto anteriormente a derivada de  $\psi_2$  em  $\phi$  é zero, portanto deve-se calcular apenas as derivadas parciais em  $z$  e  $\rho$  respectivamente. A segunda derivada da função de onda em  $z$  pode ser expressa por:

$$-\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} = \left[ \frac{(\rho^2 + z^2)^{-1/2}}{\sigma} - z^2 \frac{(\rho^2 + z^2)^{-3/2}}{\sigma} - z^2 \frac{(\rho^2 + z^2)^{-1}}{\sigma^2} \right] \psi_2 \quad (4.68)$$

Para simplificar algumas notações deve-se chamar a função Hipergeométrica Confluyente dada por  $M(u, v, \mu)$  apenas de  $M$  e as derivadas parciais em  $\rho$  dada por  $-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \psi_2}{\partial \rho} \right)$  apenas de  $\Gamma$ . Aplicando as derivada em  $\rho$ , após algumas simplificações pode-se escrever

$$\begin{aligned} \Gamma = & N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M \left( 2\gamma - \gamma^2 \rho^2 - \frac{2\gamma \rho^2}{\sigma} (\rho^2 + z^2)^{-1/2} + \frac{2}{\sigma} (\rho^2 + z^2)^{-1/2} \right) \\ & + N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M \left( -\frac{\rho^2}{\sigma} (\rho^2 + z^2)^{-3/2} - \frac{\rho^2}{\sigma^2} (\rho^2 + z^2)^{-1} \right) \\ & + N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M' \left( 2\gamma \rho + \frac{1}{\rho} + \frac{\rho}{\sigma} (\rho^2 + z^2)^{-1/2} \right) - N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M'' \end{aligned} \quad (4.69)$$

em que  $M'$  e  $M''$  são as derivadas da função Hipergeométrica Confluyente de primeira e segunda ordem, dadas por:

$$\frac{dM}{d\rho} = 2\gamma \rho \frac{u}{v} M(u+1, v+1, \gamma \rho^2) \quad (4.70)$$

$$\frac{d^2 M}{d\rho^2} = 2\gamma \frac{u}{v} M(u+1, v+1, \gamma \rho^2) + 4\gamma^2 \rho^2 \left( \frac{u^2 + u}{v^2 + v} \right) M(u+2, v+2, \gamma \rho^2). \quad (4.71)$$

Substituindo todas as expressões 4.69 e 4.68 em 4.66, pode-se finalmente escrever a aplicação do operador Hamiltoniano na função de onda como sendo

$$\begin{aligned} H\psi_2 = & \left[ 2\gamma - \frac{3}{4}\gamma^2 \rho^2 + \frac{2}{\sigma r} - \frac{2\gamma \rho^2}{\sigma r} - \frac{1}{\sigma^2} - \frac{2}{r} \right] \psi_2 \\ & + (2\gamma \rho + \frac{2\rho}{\sigma r} + \frac{1}{\rho}) \psi_2' - \psi_2'' \end{aligned} \quad (4.72)$$

em que:

$$\begin{aligned}\psi_2' &= N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M'; \\ \psi_2'' &= N_2 e^{-\frac{\gamma \rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} M''.\end{aligned}$$

Para se determinar uma expressão para energia deve-se multiplicar a equação 4.72 pelo complexo da função de onda  $\psi_2^*$  e realizar a integral em todo o espaço em coordenadas cilíndricas, no entanto a integral não tem dependência em  $\phi$ , sendo assim a solução da integral em  $\phi$  é dada pelo limite superior. Para simplificar a expressão deve-se chamar a energia para o estado fundamental de  $E_{Hip}$ , como sendo a soma das energias  $E_M + E_{M'} + E_{M''}$  como segue abaixo.

$$\begin{aligned}E_M &= 4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M^2 \left[ 2\gamma - \frac{3}{4}\gamma^2 \rho^2 - \frac{2\gamma \rho^2}{\sigma r} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\sigma r} - \frac{1}{\sigma^2} - \frac{2}{r} \right] \rho d\rho dz\end{aligned}\quad (4.73)$$

$$E_{M'} = 4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M' M \left( 2\gamma \rho + \frac{2\rho}{r\sigma} - \frac{1}{\rho} \right) \rho d\rho dz\quad (4.74)$$

$$E_{M''} = -4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M'' M \rho d\rho dz.\quad (4.75)$$

Para normalizar a função de onda deve-se integrar o produto da função de onda complexada pela função de onda em todo o espaço de coordenadas cilíndricas, feito isto pode-se escrever a constante de normalização referente a segunda função de onda escolhida como tentativa por

$$N_2^2 = \frac{\Omega^{-1}}{4\pi},\quad (4.76)$$

em que  $\Omega = \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma \rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M^2 \rho d\rho dz$ .

A constante de normalização será substituída nas expressões 4.75, 4.74 e 4.80 de forma que se possa determinar o parâmetro variacional que minimiza a energia, para várias intensidades de campo magnético aplicado e fios com diferentes raios.

## 4.3 Resultados

### 4.3.1 Níveis de Energias Por Meio do Método Variacional e de Perturbação

No início deste capítulo foi aplicado o Método Variacional e de Perturbação para determinar os níveis de energia para um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito, para isto foi considerado a equação de Schrodinger dada pela expressão 4.6, na qual

não podia ter as variáveis separáveis, no entanto foi considerado que  $\frac{1}{r} = \frac{\lambda}{z}$  para que as variáveis se tornassem separáveis, com isto a equação de Schroedinger foi dividida em duas equações 4.9 e 4.8, na qual uma determinava a energia  $E_z$  e a outra determinava a energia  $E_\rho$ , de forma que a soma destas energias corresponde aos níveis de energia para o elétron confinado em um fio quântico. Durante a resolução da equação 4.9 considerou-se que  $E_z$  deveria ser igual a  $-\lambda^2$ , para que o problema fosse resolvido e tivesse como solução uma função exponencial, no entanto os valores de  $\lambda$  em função do raio do fio e do campo magnético aplicado podem ser obtidos pela equação 4.41, de forma que a energia  $E_z$  possa ser determinada.

Para determinar  $E_\rho$ , deve ser considerado que a função de onda seja nula nas bordas do fio, no entanto para que se tenha esta condição a função  $M\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)$  deve ser igual a zero. Para que a função Hipergeométrica Confluente seja nula, o termo  $a$  que é dado por  $\frac{|m|}{2} - \frac{E_\rho}{2\gamma} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}$  deve assumir alguns valores que são obtidos numericamente, portanto ao se obter os valores do primeiro termo da função Hipergeométrica que satisfaz a condição de  $M\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right) = 0$ , pode-se determinar os valores de  $E_\rho$  e por fim os níveis de energia  $E$ , que é dado por  $E = E_\rho + E_z$ . Para a solução numérica de  $\lambda$ , por meio da expressão 4.41 e da energia  $E_\rho$  pela condição de que  $M\left(a, b, \frac{\gamma\rho^2}{2}\right)$  seja nula, serão utilizadas as seguintes constantes: raio de Bohr efetivo  $a_0^* = 98,69meV$ , Rydberg efetivo  $R_y^* = 5,83meV$  e a massa efetiva do elétron no interior do fio  $m^* = 0,067m_e$ , em que  $m_e$  corresponde a massa do elétron livre dada por  $m_e = 9,1.10^{-31}Kg$  e para a constante  $\gamma$  que tem dependência com o campo magnético aplicado, e que é dada pela relação  $\gamma = \frac{\hbar B_0 e}{2m^* c R_y^*}$ , de forma que para  $\gamma = 1$  o campo magnético tem intensidade de  $6,75T$ . Neste trabalho serão considerados  $\gamma = 1,5.10^{-3}$ ,  $\gamma = 1,5.10^{-2}$ ,  $\gamma = 1,5.10^{-1}$  e  $\gamma = 1,5$ . Os resultados obtidos numericamente do parâmetro  $\lambda$  e dos níveis de energia  $E$  em um fio quântico para diferentes valores de raios e intensidades de Campo Magnético aplicados estão apresentados nos gráficos a seguir.



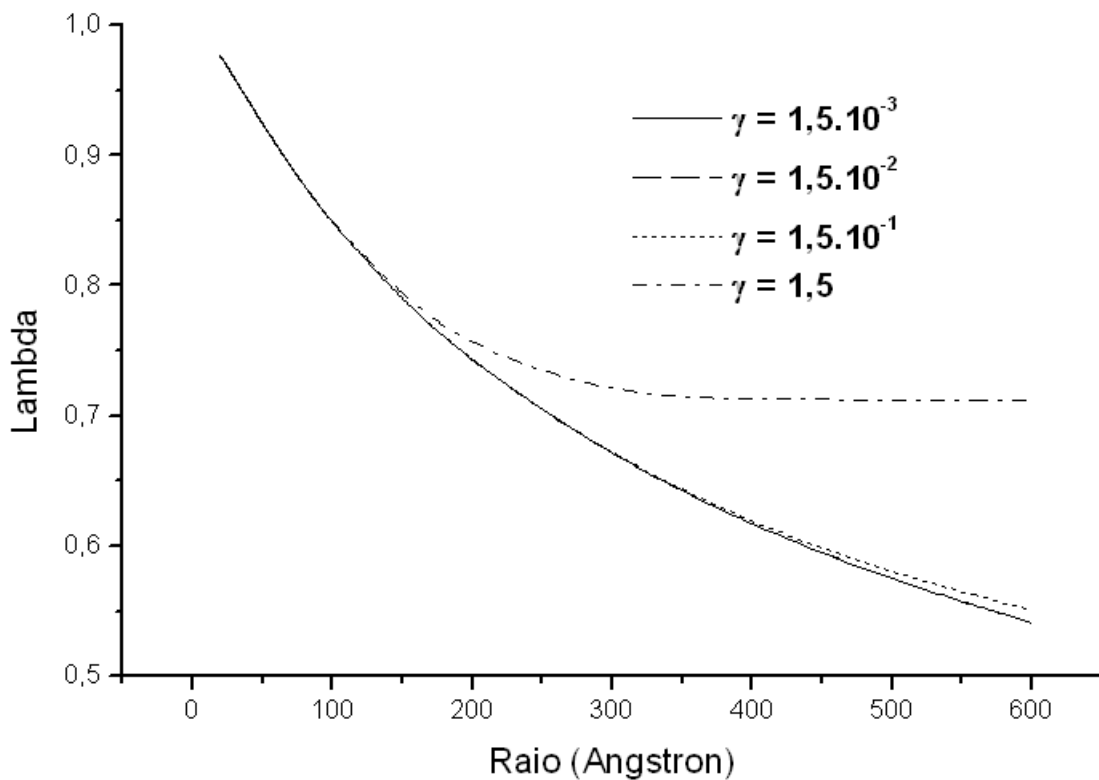


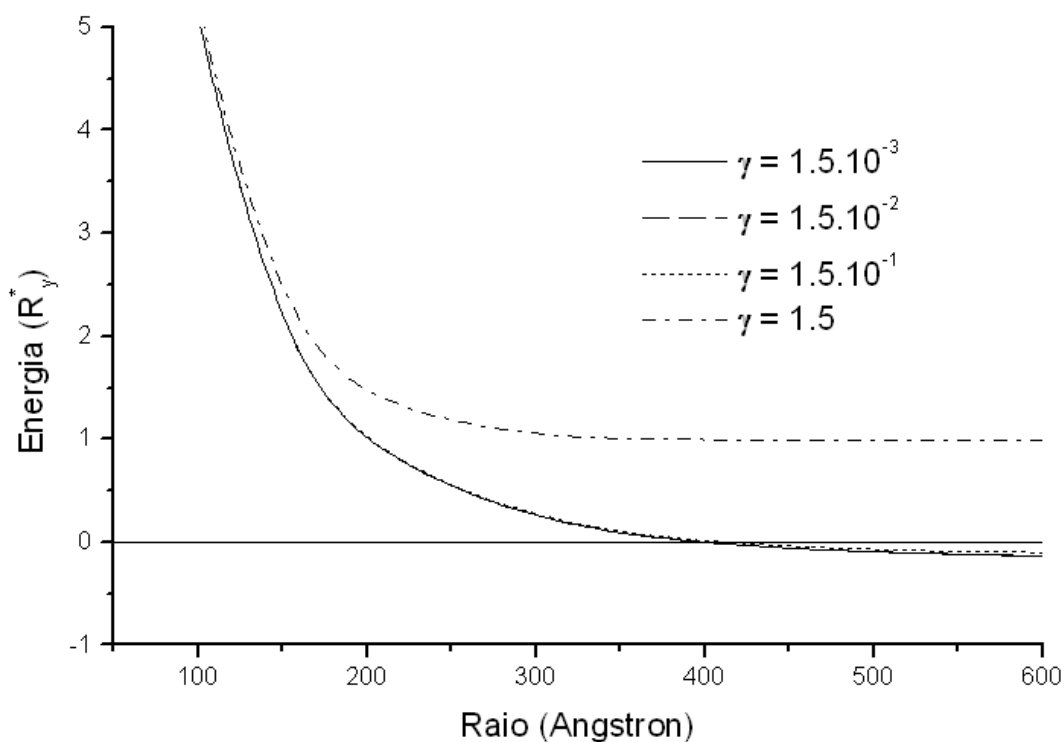
Figura 4.2: Lambda em função do raio para vários valores de campo magnético aplicado.

A Figura 4.2 representa os valores do parâmetro  $\lambda$  em função do raio do fio para várias intensidades de campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ . Pode-se observar que  $\lambda$  diminui à medida que o raio do fio cresce, mas com o aumento da intensidade do campo magnético as curvas que caracterizam os valores de  $\lambda$  em função do raio tendem a se tornar uma reta paralela ao eixo do raio do fio, de forma que qualquer valor para o raio do fio a parâmetro  $\lambda$  seja sempre igual a 1, porém se o raio do fio diminuir tendendo a zero fazendo com que  $\rho = 0$ , observa-se que  $\lambda$  deve se tornar igual a 1, para satisfazer a condição  $\frac{1}{r} = \frac{1}{z}$ . Os valores obtidos para o parâmetro  $\lambda$  em função do raio do fio e do campo magnético aplicado estão de acordo com os que foram obtidos por (NICULESCU, 2000), sendo assim pode-se determinar as energias  $E_z$  por meio da relação  $E_z = -\lambda^2$ . As curvas características para o parâmetro  $\lambda$  referente às três primeiras intensidades de campo magnético aplicado variaram pouco e podem ser comparadas melhores na tabela a seguir.

Tabela 4.1:  $\lambda$  em função do raio do fio para vários valores de  $\gamma$ .

Raio (Å)	$\lambda$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-3}$	$\lambda$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-2}$	$\lambda$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-1}$	$\lambda$ para $\gamma = 1,5$
20	0,986458	0,976226	0,976226	0,976226
25	0,977125	0,967785	0,967785	0,967786
30	0,977125	0,959112	0,959112	0,959114
35	0,959112	0,950352	0,950352	0,950355
40	0,941599	0,941599	0,941599	0,941605
45	0,932917	0,932917	0,932917	0,932929
50	0,924352	0,924352	0,924352	0,924372
60	0,907671	0,907671	0,907671	0,907720
70	0,891682	0,891682	0,891683	0,891784
80	0,876426	0,876426	0,876428	0,876616
90	0,861900	0,861900	0,861903	0,862226
100	0,848077	0,848077	0,848082	0,848605
150	0,788201	0,788201	0,788233	0,791396
200	0,740366	0,740367	0,740479	0,751119
300	0,668578	0,668064	0,668673	0,716034
400	0,615110	0,615130	0,617097	0,712509
500	0,574029	0,574077	0,578855	0,712460
600	0,540855	0,540955	0,550644	0,712459

Após obter numericamente os valores de  $\lambda$  pode-se gerar um gráfico para o comportamento dos níveis de energia em função do raio conforme mostra a seguir.

Figura 4.3: Energia em função do raio para vários valores de  $\gamma$

A Figura 4.3 representa o comportamento dos níveis de energia para um elétron confinado em um fio quântico com várias intensidades de campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$  em função do raio do fio. Pode-se observar que, para raios menores de  $300\text{\AA}$  a energia do elétron é positiva, o que significa dizer que o elétron está livre na região de confinamento, porém a medida que o raio aumenta assumindo valores superiores a  $300\text{\AA}$  a energia torna-se negativa pois o elétron fica preso a impureza pelo potencial coulombiano. Na presença de campo magnético cada vez mais intenso a energia negativa do potencial coulombiano se torna menor, e para  $\gamma = 1,5$  o elétron fica livre na região de confinamento como foi observado por (NICULESCU, 2000), porém para os níveis de energia, os resultados que foram obtidos neste trabalho foram melhores, pois os valores correspondentes aos níveis de energia para o estado fundamental sempre se apresentaram menores que os obtidos por (NICULESCU, 2000). As curvas características para os níveis de energia referente as três primeiras intensidades de campo magnético aplicado, sofreram pouca variação e seus valores podem ser comparados na tabela 4.2 a seguir.

Tabela 4.2: Energia em função do raio do fio para vários valores de  $\gamma$ .

Raio $\text{\AA}$ )	Energia $R_y^*$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-3}$	Energia $R_y^*$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-2}$	Energia $R_y^*$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-1}$	Energia $R_y^*$ $\gamma = 1,5$
20	139,863450	139,863450	139,863511	139,868485
25	89,185935	89,185935	89,186019	89,193800
30	61,665202	61,665202	61,665316	61,676536
35	45,077724	45,077724	45,077873	45,093141
40	34,317509	34,317513	34,317711	34,337646
45	26,945265	26,945268	26,945518	26,970742
50	21,676209	21,676212	21,676524	21,707648
60	14,822408	14,822414	14,822861	14,867638
70	10,700125	10,700132	10,700741	10,761602
80	8,032907	8,032915	8,033710	8,113061
90	6,211030	6,211039	6,212044	6,312247
100	4,913425	4,913437	4,914675	5,038037
150	1,882143	1,882171	1,884925	2,155651
200	0,860023	0,860072	0,864810	1,321641
300	0,178856	0,179654	0,190030	1,004308
400	-0,026317	-0,026142	-0,008791	0,992480
500	-0,104199	-0,103943	-0,078940	0,992402
600	-0,136053	-0,135716	-0,103330	0,992402

### 4.3.2 Níveis de Energias Por Meio do Método Variacional.

A aplicação do Método Variacional em duas funções de ondas escolhidas como tentativa gerarão duas expressões para os níveis de energia, na qual a equação 4.78 representa os níveis de energia obtidos pela função 4.77.

$$\psi(\rho, \phi, z) = N_1 e^{im\phi} e^{-\frac{\beta z^2}{2}} e^{-\frac{\alpha \rho^2}{2}} J_m(k\rho) \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} E_{Bessel} = & -4\pi N_1^2 \int_0^R J_m^2(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta z^2}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} dz \\ & + 2\pi N_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \int_0^R \left( 2\alpha k\rho + \frac{k}{\rho} \right) J_{m+1}(k\rho) J_m(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \\ & - 2\pi N_1^2 \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \int_0^R \left( \alpha^2 \rho^2 - 2\alpha + k^2 - \frac{1-2\beta^2}{2\beta} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \right) J_m^2(k\rho) e^{-\alpha \rho^2} \rho d\rho \end{aligned} \quad (4.78)$$

O comportamento dos níveis de energia em função do raio do fio obtidos numericamente pela expressão 4.78 para um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito, na qual foram utilizadas as mesmas constantes para o Rydberg efetivo, o raio de Bohr efetivo e para  $\gamma$  que foram aplicados no Método Variacional e de Perturbação, sendo assim os resultados podem ser observados no gráfico abaixo.

A Figura 4.4 representa o comportamento dos níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito em função do raio do fio e para várias intensidades de campo magnético aplicado. Pode-se observar que, para raios menores que  $150\text{\AA}$  a energia do elétron corresponde a uma energia positiva, e que para raios maiores que  $150\text{\AA}$  o elétron fica preso a impureza por meio do potencial Coulombiano, e que, com o aumento da intensidade do campo magnético aplicado os valores dos níveis de energia aumentam, porém se comparar os resultados obtidos pela primeira função de onda aplicada ao Método Variacional com os que foram obtidos com o Método Variacional e de Perturbação, nota-se que os resultados apresentados pelo Método Variacional foram melhores, pois como foi citado no Capítulo 2 os valores de energia são melhores quanto menor for a energia obtida para o estado fundamental. Para que se possa ter uma visão quantitativa dos resultados obtidos para os níveis de energias com a primeira função de onda escolhida como tentativa para diferentes intensidade de campo magnético aplicado tem-se a tabela 4.3 a seguir.

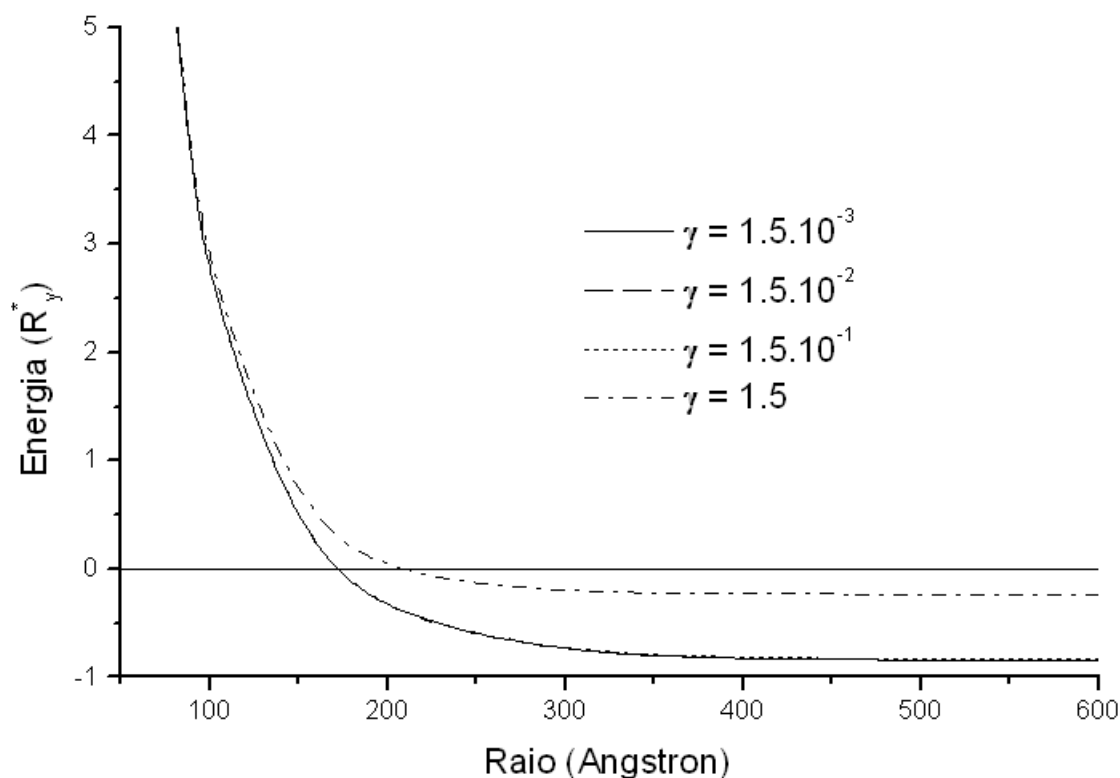


Figura 4.4: Energia  $E_{Bessel}$  em função do raio para vários valores de  $\gamma$

Tabela 4.3: Energia  $E_{Bessel}$  em função do raio para vários valores de  $\gamma$ .

Raio( $\text{\AA}$ )	$E_{Bessel}$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-3}$	$E_{Bessel}$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-2}$	$E_{Bessel}$ $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-1}$	$E_{Bessel}$ $\gamma = 1,5$
20	131,879961	131,879961	131,880011	131,884965
25	82,340681	82,340681	82,340759	82,348477
30	55,654873	55,654874	55,654985	55,666067
35	39,709836	39,709837	39,709988	39,725022
40	29,461215	29,461217	29,461413	29,480981
45	22,507041	22,507044	22,507291	22,531964
50	17,586633	17,586636	17,586939	17,617281
60	11,282293	11,282298	11,282731	11,326053
70	7,574236	7,574242	7,574827	7,633246
80	5,230893	5,230901	5,231657	5,307187
90	3,669335	3,669344	3,670292	3,764833
100	2,585547	2,585559	2,586716	2,702035
150	0,225997	0,226021	0,228464	0,468270
200	-0,445803	-0,445763	-0,441760	-0,065280
300	-0,779798	-0,779726	-0,772608	-0,220687
400	-0,833773	-0,833683	-0,824758	-0,231103
500	-0,840270	-0,840177	-0,830909	-0,233048
600	-0,846767	-0,846670	-0,837060	-0,233655

A expressão que determina os níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito, que foi obtida por meio do Método Variacional aplicado na segunda função de onda escolhida como tentativa 4.79, é dada pela equação 4.80 e seus resultados podem ser obtidos numericamente minimizando a energia em função do parâmetro variacional, de forma que as constantes utilizadas foram as mesmas aplicadas a primeira função, sendo assim o comportamento dos níveis de energia podem ser observados no gráfico a seguir.

$$\psi_2 = N_2 e^{im\phi} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{2}} e^{-\frac{r}{\sigma}} (\gamma\rho^2)^{\frac{|m|}{2}} M(u, v, \mu), \quad (4.79)$$

$$\begin{aligned} E_{Hip} = & 4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma\rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M^2 \left[ 2\gamma - \frac{3}{4}\gamma^2\rho^2 - \frac{2\gamma\rho^2}{\sigma r} + \frac{2}{\sigma r} - \frac{1}{\sigma^2} - \frac{2}{r} \right] \rho d\rho dz \\ & + 4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma\rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M' M \left( 2\gamma\rho + \frac{2\rho}{r\sigma} - \frac{1}{\rho} \right) \rho d\rho dz \\ & - 4\pi N_2^2 \int_0^\infty \int_0^R e^{-\gamma\rho^2} e^{-\frac{2r}{\sigma}} M'' M \rho d\rho dz. \end{aligned} \quad (4.80)$$

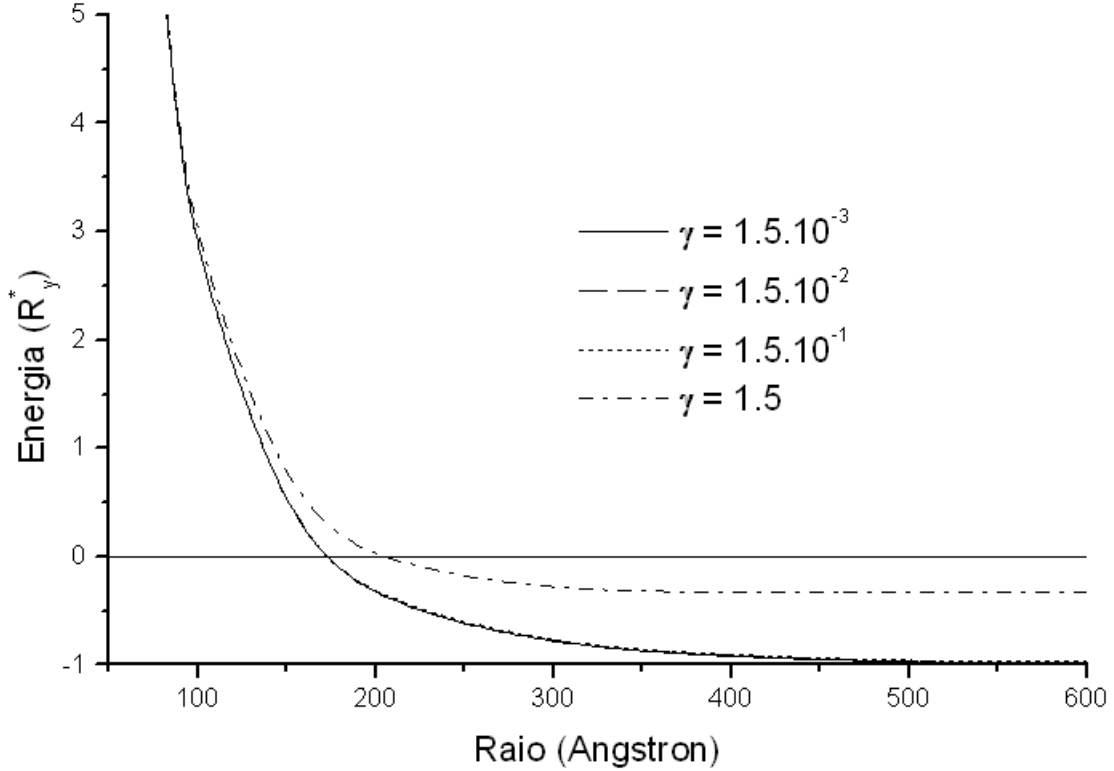


Figura 4.5: Energia  $E_{Hip}$  em função do raio para vários valores de  $\gamma$ .

A Figura 4.5 representa o comportamento dos níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito em função do raio do fio e para várias

intensidades de campo magnético aplicado. Pode-se observar que, para raios menores que 150Å a energia do elétron corresponde a uma energia positiva, e que para raios maiores que 150Å o elétron fica preso a impureza por meio do potencial Coulombiano, e que, com o aumento da intensidade do campo magnético aplicado os valores dos níveis de energia aumentam, porém se comparar os resultados obtidos pela primeira função de onda aplicada ao Método Variacional com os que foram obtidos com o Método Variacional e de Perturbação, nota-se que os resultados apresentados para os níveis de energias de um elétron confinado em um fio quântico foram melhores para o Método Variacional, pois como foi citado no Capítulo 2 os valores de energia são melhores quanto menor for a energia obtida para o estado fundamental. Para que se possa ter uma visão quantitativa dos resultados obtidos para os níveis de energia com a primeira função de onda escolhida como tentativa para diferentes intensidade de campo magnético aplicado pode-se observar a tabela 4.4 a seguir.

Tabela 4.4: Energia  $E_{Hip}$  em função do raio para vários valores  $\gamma$ .

$raio(\text{Å})$	$E_{Hip}$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-3}$	$E_{Hip}$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-2}$	$E_{Hip}$ para $\gamma = 1,5 \cdot 10^{-1}$	$E_{Hip}$ para $\gamma = 1,5$
20	132,23612	132,23612	132,23649	132,24715
25	82,582297	82,582298	82,582387	82,589781
30	55,976451	55,976459	55,976551	55,983480
35	39,981923	39,981932	39,982017	39,986138
40	29,782591	29,782598	29,782811	29,794662
45	22,839932	22,839939	22,840042	22,865819
50	17,816901	17,817012	17,817348	17,818216
60	11,474654	11,474676	11,474968	11,518492
70	7,734115	7,734139	7,734357	7,791402
80	5,362833	5,362851	5,361027	5,423620
90	3,777054	3,777079	3,777412	3,861084
100	2,724155	2,724173	2,724611	2,849371
150	0,238171	0,239654	0,240017	0,491023
200	-0,433501	-0,432182	-0,420015	-0,068244
300	-0,831171	-0,831108	-0,814334	-0,319065
400	-0,925315	-0,921310	-0,916138	-0,325571
500	-0,979459	-0,974355	-0,961515	-0,328923
600	-0,990071	-0,989815	-0,971533	-0,329167

### 4.3.3 Comparação dos Resultados Obtidos Para os Níveis de Energia

Neste capítulo foi utilizado o Método Variacional e de Perturbação para determinar os níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$  como fez (NICULESCU, 2000) e ainda o Método Variacional aplicado em duas funções de ondas escolhidas como tentativa para melhor comparar os resultados obtidos. Devido os diferentes valores obtidos para os níveis de energia em ambos os métodos, será feita uma comparação entre os comportamentos dos níveis de energias em função do raio do fio para  $\gamma = 1,5$ , sendo que os resultados obtidos pelo Método Variacional e de Perturbação chamados de  $E_\lambda$  e os obtidos pelo Método Variacional chamados respectivamente de  $E_{Bessel}$  e  $E_{Hip}$  de acordo com as duas funções de ondas escolhidas como tentativa.

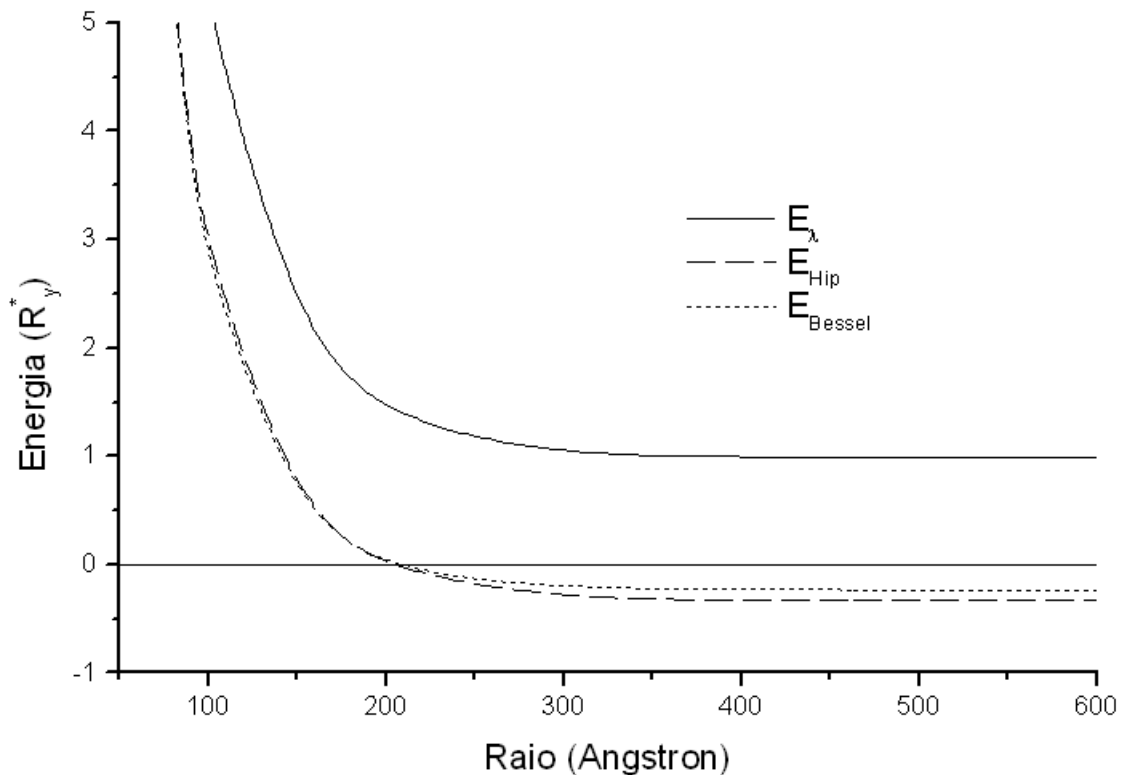


Figura 4.6: Energias  $E_\lambda$ ,  $E_{Hip}$  e  $E_{Bessel}$  em função do raio e para  $\gamma = 1,5$ .

A Figura 4.6 representa o comportamento dos níveis de energia de um elétron confinado em um fio quântico com barreiras de potencial infinito em função do raio do fio e  $\gamma = 1,5$  referente ao Método Variacional e de Perturbação e o Método Variacional. Pode-se observar que os resultados obtidos pelo Método Variacional se mostraram melhores para todos os raios do fio em ambas as funções de ondas escolhidas como tentativa, de forma que para a segunda função de onda escolhida os resultados foram ainda melhores, porém é preciso notar que para raios menores que  $50\text{\AA}$  os resultados foram muito próximos para ambos os métodos, mostrando



que o Método Variacional e de Perturbação pode oferecer resultados satisfatórios para certos valores de raios, no entanto o que se observa é que o Método Variacional pode ser muito bem aplicado em problemas da Mecânica Quântica que não tem variáveis separáveis na equação de Schroedinger, tomando-se apenas o cuidado na escolha das funções de onda como tentativa. A tabela 4.5 mostra quantitativamente o comportamento dos níveis de energia em função do raio representados na figura 4.6.

Tabela 4.5: Energia  $E_\lambda$ ,  $E_{Hip}$  e  $E_{Bessel}$  em função do raio e para  $\gamma = 1, 5$ .

Raio $\text{\AA}$	$E_\lambda$	$E_{Bessel}$	$E_{Hip}$
20	139,868485	131,884965	132,24715
25	89,193800	82,348477	82,589781
30	61,676536	55,666067	55,983480
35	45,093141	39,725022	39,986138
40	34,337646	29,480981	29,794662
45	26,970742	22,531964	22,865819
50	21,707648	17,617281	17,818216
60	14,867638	11,326053	11,518492
70	10,761602	7,633246	7,791402
80	8,113061	5,307187	5,423620
90	6,312247	3,764833	3,861084
100	5,038037	2,702035	2,849371
150	2,155651	0,468270	0,491023
200	1,321641	-0,065280	-0,068244
300	1,004308	-0,220687	-0,319065
400	0,992480	-0,231103	-0,325571
500	0,992402	-0,233048	-0,328923
600	0,992402	-0,233655	-0,329167

## *Conclusões*

Neste trabalho foi apresentado o Método Variacional, assim como sua consistência em diversas aplicações. Em seguida fez-se o uso deste método para resolver um problema envolvendo poços quânticos retangulares, a fim de determinar a densidade de estados da impureza doadora. Os cálculos foram feitos primeiramente para um poço de potencial infinito e em seguida foi estendido para um caso mais realista, correspondente a um poço quântico com altura de potencial finito.

Tanto para o caso de potencial finito quanto para o infinito foram aplicados dois tipos de funções tentativa, uma com forma Gaussiana e outra Hidrogenóide. Os resultados obtidos com o segundo tipo de função de onda, se apresentaram melhores nos dois casos, embora isto tenha ocorrido apenas para poços quânticos com largura de até  $300\text{Å}$ , pois quanto maior se tornava a largura do poço, pior ficava o resultado. No entanto, dentro do limite de zero até  $300\text{Å}$ , os resultados estavam bem de acordo com os que foram apresentados por (BASTARD, 1981), que fez uso de uma função de onda mais complexa.

O objetivo do trabalho foi aplicar o Método Variacional, fazendo uso de uma funções simples, e como neste trabalho estão sendo analisados problemas voltados para a área de nanotecnologia, onde geralmente um poço quântico tem suas dimensões de no máximo  $300\text{Å}$ , pode-se considerar os resultados obtidos satisfatórios. Para o poço de potencial finito o comportamento dos resultados também se fez melhor para a função Hidrogenóide, e na medida que se aumentava a altura da barreira de potencial os valores tendiam para os do poço infinito, porém dentro do limite especificado anteriormente.

Os cálculos para os níveis de energia em um fio quântico cilíndrico, e com campo magnético aplicado ao longo do crescimento do fio, foram realizados por meio do Método Variacional e do Método Variacional e de Perturbação. Para o caso do segundo método, os resultados para os níveis de energia foram melhores do que os que foram apresentados por (NICULESCU, 2000), porém os resultados obtidos com o Método Variacional, foram melhores que os do Método Variacional e de Perturbação para ambas as funções escolhidas como tentativa, mas com diferenças nas regiões para as duas funções de onda. A primeira função escolhida tinha dependência com uma função de Bessel, e seus resultados foram melhores para fios com raios menores que

150Å. A segunda função de onda tinha dependência com uma função Hipergeométrica Confluyente, e teve resultados melhores para fios com raios maiores, portanto considerando que os fios quânticos também tem dimensões nanométricas, concluimos que os resultados obtidos pela segunda função de onda escolhida como tentativa foram melhores, pois a medida que o raio do fio se tornava maior a energia obtida com esta função tendia para  $-1,0R_y^*$  mais rapidamente que as obtidas pela função de onda dependente de uma função de Bessel.

As dificuldades em se aplicar o Método Variacional ainda são muito grandes, pois para uma função de onda escolhida como tentativa ter bons resultados em todos os limites considerados para qualquer estrutura de semicondutores, requer um número maior de tentativas e escolhas de funções as vezes mais complexas. Para trabalhos futuros, pode-se aprimorar as funções escolhidas e aplicá-las em problemas com geometria diferentes, tais como um poço de potencial triangular ou fios quânticos com campo magnético aplicado perpendicularmente à direção de crescimento do fio.

## *Referências*

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. (Ed.). *Handbook Mathematical Functions*. New York: Dover, 1968.
- ALVES, O. L.; RONCONI, C. M. Decomposição de precursores metalorgânico: uma técnica química de obtenção de filmes finos. *Nova*, v. 25, n. 1, p. 69–77, 2002.
- ARFKEN, G. (Ed.). *Mathematical Methods for Physicists*. New York: Academic Press, 1971.
- BASTARD, G. Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model. *Physical Review B*, v. 24, n. 8, p. 4714–4721, October 1981.
- BELLA, R. S. D.; NAVANEETHAKRISHNAN, K. Donor binding energies and spin-orbit coupling in a spherical quantum dot. *Solid State Commun*, v. 130, p. 773–776, 2004.
- BRYANT, G. W. Hydrogenic impurity states in quantum well wires. *Physical Review B*, v. 29, n. 12, June 1984.
- BUTKOV, E. (Ed.). *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Koogan S.A, 1968.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica*. 16<sup>a</sup>. ed. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.
- FLEMMING, D. M.; GONÇALVES, M. B. *Cálculo A*. 5<sup>a</sup>. ed. São Paulo: Editora UFSC and Makron Books do Brasil, 1992.
- GONDAR, J. L.; CASTRO, J. A. e; OLIVEIRA, L. E. Electric-field effects on shallow impurity gas-algas quantum wells. *Physical Review B*, v. 42, n. 11, October 1990.
- LEE, K. S.; AOYAGI, Y.; SUGANO, T. Modified perturbational method for the magnetoexciton ground state in quantum wells. *Physical Review B*, v. 46, n. 16, October 1992.
- MACHADO, P. C. M.; OSÓRIO, A. N. B. F. A. P.; ALMEIDA, R. B. Nanotecnologia de materiais semicondutores. *Estudos*, v. 30, n. 6, Junho 2003.
- MACHADO, P. C. M. et al. Energia de ligação de uma impureza doadora em um fio quântico retangular. *Estudos*, v. 31, n. 12, dezembro 2004.
- MACHADO, P. C. M. et al. Autovalores da equação de schrödinger para estados de impurezas em pontos quânticos. *Escola de Engenharia Elétrica e de Computação UFG*, 2001.
- NICULESCO, E. et al. Magnetic field dependence of the binding energy of shallow donors in gas quantum-well wires. *Superlattices and Microstructures*, v. 29, n. 5, p. 113–116, 2001.
- NICULESCU, E. Hydrogenic states in gas quantum-well wires under applied magnetic fields. *Splaiul Independentei*, v. 313, November 2000.

- OSÓRIO, F. A. P.; HIPÓLITO, O.; PEETERS, F. M. Effects of confinement of shallow impurities in gaas-algaas quantum dots-material. *Research Simposium Proceedings*, v. 281, 1993.
- OSÓRIO, F. A. P.; HIPÓLITO, O.; PEETERS, F. M. The effects of magnetic field on the energy levels of shallow donor impurities in gaas-alxgax-las quantum dots. *Microelectronics Journal*, v. 36, p. 244–246, 2005.
- SHOCKLEY, W. The theory of p-n junction in semiconductors and p-n junction transistors. *Bell Syst. Tech. J.*, p. 28, 435, 1949.
- SHOCKLEY, W. U.s. patent. *No 2569347*, 1951.
- WALDEMAR, W. F. *Mecânica Quântica*. Goiânia: Editora UFG, 2002.
- WEBER, G.; SCHULZ, P. A.; OLIVEIRA, L. E. Density of states energy spectra of hydrogenic impurities in quantum-well wires. *Physical Review B*, v. 38, n. 3, January 1988.
- ZHENG, X. L.; HEIMAN, D.; LAX, B. Magnetoexciton ground state in quantum well: A variational and perturbation approach. *Physical Review B*, v. 40, n. 15, November 1989.

## ***APÊNDICE A – Apêndice A - Solução Analítica da Equação de Schroedinger para um Poço de Potencial Quadrado***

Será apresentado aqui a solução da equação de Schroedinger independente do tempo para os estados ligados de um poço de potencial quadrado de profundidade finita conforme mostra a Figura A.1. A descrição do movimento clássico de uma partícula em um estado ligado em um poço quadrado sugere que seria mais apropriado procurar soluções para a equação de Schroedinger na forma de ondas estacionárias. Assim considera-se como uma solução geral para a equação de Schroedinger independente do tempo na região em que  $-L/2 < z < L/2$ , onde  $V(z)$  é igual a zero, a auto função de onda estacionária para a partícula livre que pode ser escrita pela equação A.1.

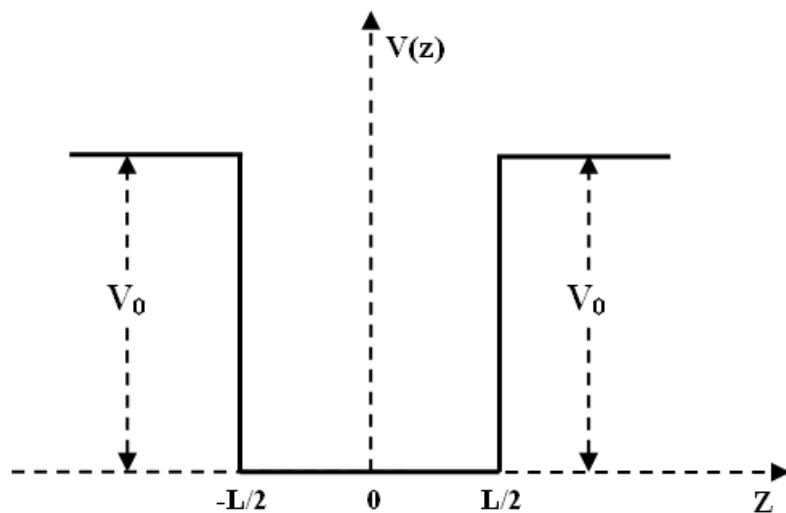


Figura A.1: Poço quântico de potencial quadrado de largura  $L$  e altura  $V_0$ .

$$\psi(z) = A \sin(k_1 z) + B \cos(k_1 z) \quad (\text{A.1})$$

Onde  $A$  e  $B$  são constantes de normalização,  $k_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar}$ , sendo  $m_1^*$  a massa efetiva do elétron dentro do poço,  $E$  a energia do elétron e  $\hbar$  a constante de planck dividida por  $2\pi$ . Nas regiões  $z < -L/2$  e  $z > L/2$  a equação de Schroedinger independente do tempo tem as soluções gerais dadas por A.2 e A.3 respectivamente.

$$\psi(z) = Ce^{k_2z} + De^{-k_2z}; \quad (\text{A.2})$$

$$\psi(z) = Fe^{k_2z} + Ge^{-k_2z}, \quad (\text{A.3})$$

em que  $C$ ,  $D$ ,  $F$  e  $G$  são constante de normalizado,  $k_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0-E)}}{\hbar}$ , sendo  $m_2^*$  a massa efetiva do elétron fora do poço de potencial. Para determinar as constantes arbitrárias, inicialmente deve-se exigir que as auto funções permaneçam finitas para todos os  $z$ . Considerando-se que as funções de onda fora do poço tendem a zero quando  $z$  tender para mais ou menos infinito é evidente que essa exigência obriga que  $D$  e  $F$  sejam iguais a zero. Outra exigência imposta é a da continuidade, em que as auto funções para  $z = -L/2$  e  $z = L/2$  é a razão entre as primeiras derivadas pela massa efetiva de cada região também sejam iguais neste ponto. Levando em conta estas exigências pode-se escrever as seguintes relações:

$$-A\text{sen}(k_1L/2) + B\text{cos}(k_1L/2) = Ce^{-k_2L/2} \quad (\text{A.4})$$

$$Ak_1\text{cos}(k_1L/2) + Bk_1\text{sen}(k_1L/2) = \frac{m_1^*}{m_2^*}Ck_2e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.5})$$

$$A\text{sen}(k_1L/2) + B\text{cos}(k_1L/2) = Ge^{-k_2L/2} \quad (\text{A.6})$$

$$Ak_1\text{cos}(k_1L/2) - Bk_1\text{sen}(k_1L/2) = -\frac{m_1^*}{m_2^*}Gk_2e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.7})$$

Para se obter uma relação comum entre as equações acima deve-se subtrair A.4 de A.6, em seguida somar A.4 e A.6, de forma que se possa escrever as seguintes expressões:

$$2A\text{sen}(k_1L/2) = (G - C)e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.8})$$

$$2B\text{cos}(k_1L/2) = (G + C)e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.9})$$

De forma análoga deve-se subtrair e somar as equações A.5 e A.7, com isto obtém-se as equações A.10 e A.11.

$$2Bk_1 \text{sen}(k_1L/2) = \frac{m_1^*}{m_2^*}(G+C)k_2e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.10})$$

$$2Ak_1 \text{cos}(k_1L/2) = -\frac{m_1^*}{m_2^*}(G-C)k_2e^{-k_2L/2} \quad (\text{A.11})$$

Observa-se que, se  $A \neq 0$  e  $G-C \neq 0$  pode-se dividir A.10 pela A.9, que se obtém a seguinte equação transcendental.

$$k_1 \text{tg} \left( \frac{k_1L}{2} \right) = \frac{m_1^*}{m_2^*}k_2 \quad (\text{A.12})$$

No entanto, se  $D \neq 0$  e  $G+C \neq 0$  pode-se dividir A.11 pela A.8, que se obtém outra equação transcendental dada por:

$$k_1 \text{cotg} \left( \frac{k_1L}{2} \right) = -\frac{m_1^*}{m_2^*}k_2. \quad (\text{A.13})$$

Nota-se que as duas equações transcendentais não podem ser satisfeitas simultaneamente, pois se fossem teria-se a seguinte condição.

$$k_1 \text{tg} \left( \frac{k_1L}{2} \right) + k_1 \text{cotg} \left( \frac{k_1L}{2} \right) = 0 \quad (\text{A.14})$$

Se dividir a A.15 por  $\text{tg} \left( \frac{k_1L}{2} \right)$ , chega-se a relação abaixo que não pode ser verdadeira pois tanto  $k_1$  como  $L$  são reais.

$$\text{tg}^2 \left( \frac{k_1L}{2} \right) = -1 \quad (\text{A.15})$$

Portanto pode-se escolher uma das condições impostas e considerar apenas uma das equações transcendentais. Para este caso será escolhida a primeira equação transcendental, pois estão sendo considerados neste trabalho os cálculos das energias para o estado fundamental, feito isto e substituindo as relações obtidas pode-se escrever as seguintes auto funções para um elétron dentro do poço de potencial quadrado.

$$\psi_I = B \cos\left(\frac{k_1L}{2}\right) e^{-\frac{k_2L}{2}} e^{k_2z} \quad z < -L/2 \quad (\text{A.16})$$

$$\psi_{II} = B \cos(k_1z) \quad L/2 < z < L/2 \quad (\text{A.17})$$

$$\psi_{III} = B \cos\left(\frac{k_1L}{2}\right) e^{-\frac{k_2L}{2}} e^{-k_2z} \quad z > L/2 \quad (\text{A.18})$$



## *APÊNDICE B – Apêndice B - Determinação do Vetor Potencial $\mathbf{A}$ em Termos do Campo Magnético Aplicado.*

Será considerado primeiramente um campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ , em um fio cilíndrico de coordenadas cartesianas, conforme apresentado na figura B.1.

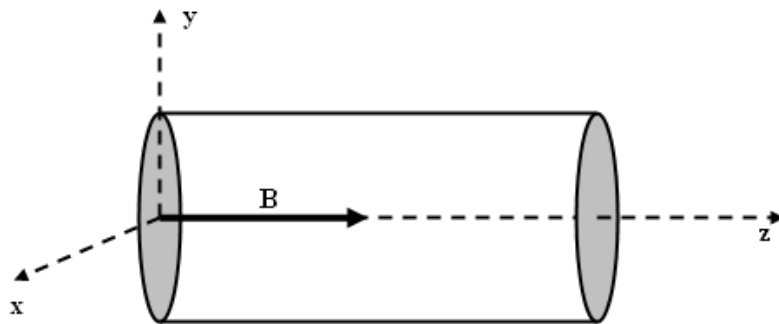


Figura B.1: Fio quântico cilíndrico em coordenadas cartesianas com campo magnético aplicado ao longo do eixo  $z$ .

Pode-se escrever os vetores campo magnético  $\mathbf{B}$  e potencial vetor  $\mathbf{A}$ , respectivamente por  $\mathbf{B} = B_0\hat{x} + B_0\hat{y} + B_0\hat{z}$  e  $\mathbf{A} = A_x\hat{x} + A_y\hat{y} + A_z\hat{z}$ . Como o campo magnético está aplicado apenas ao longo de  $z$ , as componentes  $x$  e  $y$  do vetor  $\mathbf{B}$  são nulas, então relacionando os vetores  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{A}$ , por meio de  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , obtém-se a seguinte relação.

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Aplicando o rotacional no potencial vetor  $\mathbf{A}$ , pode-se escrever:

$$B_0\hat{z} = \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \hat{z}, \quad (\text{B.2})$$

em que se for considerado  $A_x = 0$ , tem-se  $A_y = B_0x$ , mas se considerar  $A_y = 0$ , tem-se  $A_x = -B_0y$ , no entanto sabe-se que  $\mathbf{B} = B_0\hat{z}$  e que  $\mathbf{A} = A_x\hat{x} + A_y\hat{y} + A_z\hat{z}$ , portanto deve-se fazer  $\mathbf{A} = B_0(-y\hat{x} + x\hat{y})$ , de tal forma que se possa aplicar o rotacional de  $\mathbf{B}$  novamente no potencial vetor  $\mathbf{A}$ , para se obter a seguinte relação.

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ -yB_0 & xB_0 & 0 \end{pmatrix} = 2B_0\hat{z} \quad (\text{B.3})$$

Como foi visto anteriormente que  $\mathbf{B} = B_0\hat{z}$ , então a expressão B.3 não é verdadeira, mas no entanto pode-se corrigir esta diferença fazendo  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B_0(-y\hat{x} + x\hat{y})$ . Para poder escrever o vetor potencial  $\mathbf{A}$ , em coordenadas cilíndrica deve-se considerar

$$y = \rho \sin\phi;$$

$$x = \rho \cos\phi.$$

Substituindo na expressão do vetor potencial  $\mathbf{A}$  pode-se escrever a seguinte relação:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}B_0\rho(-\sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y}) \quad (\text{B.4})$$

Portanto substituindo o termo entre parêntese da equação B.4 pelo vetor unitário na direção de  $\phi$ , obtém-se finalmente uma relação entre o campo magnético, e o vetor potencial  $\mathbf{A}$ , pela seguinte relação

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}B_0\rho\hat{\phi} \quad (\text{B.5})$$

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)