

Autovalores da Equação de Schrödinger para Estados de Impurezas em Pontos Quânticos

Adriana Brito Aguiar Marques, Paulo César Miranda Machado

Escola de Engenharia Elétrica e de Computação, UFG, C.P. 131, 74001-970, Goiânia, GO

E-mail: adrianabamarques@hotmail.com, pcesar@eee.ufg.br

Francisco Aparecido Pinto Osório, Antônio Newton Borges

Instituto de Física, UFG, C.P. 131, 74001-970, Goiânia, GO

Núcleo de Pesquisa em Física, MAF, UCG, 74001-970, Goiânia, GO

E-mail: fosorio@fis.ufg.br, newton@fis.ufg.br.

1. Introdução

Um ponto quântico é uma estrutura construída a partir de materiais semicondutores, capaz de confinar um número finito de elétrons em seu interior. Nessas estruturas o movimento eletrônico é quantizado nas três direções espaciais.

Nos últimos anos os pontos quânticos têm atraído muita atenção devido às suas aplicações em dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, apresentando também perspectivas em novas aplicações tecnológicas tais como os futuros computadores quânticos.

Muitos trabalhos têm sido feitos sobre o estudo das propriedades eletrônicas dessas estruturas considerando diferentes formas geométricas [3,4,5,7]. Geralmente o modelo mais comum utilizado no estudo dos pontos quânticos considera que os elétrons não podem escapar para o exterior do ponto, o que corresponde ao modelo de barreiras de potencial de alturas infinitas. Este tipo de aproximação tem como principal vantagem o fato de simplificar os cálculos e dar uma visão qualitativa do sistema.

Neste trabalho consideramos um modelo mais realista, ou seja, um ponto quântico circular de raio R (disco quântico) com barreira de potencial de altura finita, e calculamos as energias dos estados de uma impureza localizada no centro do disco em função do raio do disco.

2. Teoria

Consideramos uma impureza doadora localizada no centro de um disco quântico (DQ) circular de raio R , composto de GaAs e envolto por $\text{Al}_\chi\text{Ga}_{1-\chi}\text{As}$, onde χ é a concentração de alumínio na liga ($0 \leq \chi \leq 1$). No nosso modelo consideramos o movimento apenas no plano (r, θ) e que o potencial na direção z , perpendicular ao plano (r, θ) , seja muito mais forte que nas outras duas direções, de tal modo que desprezamos seus efeitos sobre a dinâmica do movimento eletrônico.

A equação de Schrödinger de um elétron ligado à impureza central e confinado no DQ é escrita na forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} + V(r) \right) \psi = E\psi \quad (1)$$

onde $V(r)$ é a função potencial de confinamento, que assume o valor nulo dentro do DQ ($r < R$) e valor $V_0 = 214$ meV para $r > R$. Esse valor de potencial corresponde a uma concentração de alumínio $\chi = 0,3$. A massa efetiva eletrônica também assume diferentes valores dentro e fora do DQ, sendo que no GaAs ($r < R$) $m_1^* = 0,067m_e$ e no $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ ($r > R$), $m_2^* = 0,0919m_e$, onde m_e é a massa do elétron livre.

Em coordenadas cilíndricas e unidades adimensionais, onde os comprimentos são escritos em unidades de raio de Bohr efetivo, $a_0 = (\epsilon_0 \hbar^2) / (m_1^* e^2)$ e as energias em unidades de Rydberg efetivo, $Ry = (e^2) / (2m_1^* a_0^2)$, escrevemos a equação de Schrödinger da seguinte forma,

$$-\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + V(r) - \frac{2}{r} \psi = E\psi \quad (2)$$

A equação (2) é separável e sendo assim, escrevemos,

$$\psi(r, \theta) = F(r)e^{im\theta}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3)$$

Substituindo-se esta expressão na equação (2), obtemos as seguintes equações diferenciais ordinárias satisfeita pela função $F(r)$, dentro do DQ ($r < R$),

$$F''(r) + \frac{F'(r)}{r} + \left(\frac{2}{r} + E - \frac{m^2}{r^2} \right) F(r) = 0 \quad (4)$$

e fora do DQ ($r > R$),

$$F''(r) + \frac{F'(r)}{r} + \left(\frac{2}{r\delta} - \frac{V_0 - E}{\delta} - \frac{m^2}{r^2} \right) F(r) = 0 \quad (5)$$

onde $F'(r)$ e $F''(r)$ denotam as derivadas de primeira e segunda ordem de $F(r)$ e o parâmetro δ é dado pela relação $\delta = m_1^* / m_2^*$.

O autovalor E , dependendo do raio do DQ, pode assumir valores positivos ou negativos. Autovalores negativos ($E < 0$) representam estados em que o elétron está ligado à impureza doadora. Neste caso podemos, através da mudança de coordenadas $\xi = (2r)/\lambda$, colocar a equação (4) na seguinte forma,

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial F}{\partial \xi} + \left(\frac{\lambda}{\xi} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\xi^2} \right) F = 0 \quad (6)$$

onde o parâmetro λ é um número real e positivo e está relacionado com o autovalor E através da relação $E = -1/\lambda^2$.

Prosseguindo, para eliminarmos a derivada primeira da equação (6), fazemos a transformação $F(\xi) = \phi(\xi)/\sqrt{\xi}$. Assim, chegamos à seguinte equação para $\phi(\xi)$:

$$\phi''(\xi) + \left(\frac{\lambda}{\xi} - \frac{1}{4} + \frac{\frac{1}{4} - m^2}{\xi^2} \right) \phi(\xi) = 0 \quad (7)$$

que é a conhecida equação de Whittaker [1,2], cuja solução é

$$\phi(\xi) = A e^{-\xi/2} \xi^{|m|} M(|m| + 1/2 - \lambda, 2|m| + 1; \xi) \quad (8)$$

onde A é uma constante de normalização e $M(a, b; x)$ é a função hipergeométrica conflúente [2], definida como:

$$M(a, b; x) = 1 + \frac{ax}{b \cdot 1!} + \frac{a(a+1)x^2}{b(b+1) \cdot 2!} + \dots \quad (9)$$

com a condição $b \neq 0, -1, -2, \dots$. Esta função converge para todo x finito, tem uma singularidade no infinito ($x \rightarrow \infty$) e se torna um polinômio se o parâmetro a é zero ou um inteiro negativo.

As soluções na região de energias positivas ($E > 0$) são obtidas de maneira análoga, observando-se que, para que a energia $E = -1/\lambda^2$ seja um número real e positivo, o parâmetro λ deve ser um número imaginário, da forma $\lambda = i\eta$, onde η é um número real. Isto resulta em soluções da mesma forma da equação (8), sendo agora λ e ξ números imaginários.

Na região fora do DQ ($r > R$) a função de onda será obtida resolvendo-se a equação (5). Seguindo o mesmo procedimento anterior, com o uso da relação $E = V_0 - 1/(\lambda_1^2 \delta) = -1/\lambda^2$, onde o parâmetro λ pode ser real ou imaginário, dependendo se a energia for negativa ou positiva e com a transformação $\zeta = 2r/(\lambda_1 \delta)$, chegamos à equação:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{\partial F}{\partial \zeta} + \left(\frac{\lambda_1}{\zeta} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\zeta^2} \right) F = 0 \quad (10)$$

que tem a mesma forma da equação (6). No entanto, a autofunção dessa equação tem uma condição de contorno extra a satisfazer, pois a região externa estende-se ao infinito e assim, para $r \rightarrow \infty$, a autofunção deve assumir o valor zero. A primeira solução da função hipergeométrica conflúente, $M(a, b; x)$, não satisfaz essa condição, mas a segunda solução, $U(a, b; x)$, satisfaz. Tal função pode ser escrita como [2]:

$$U(a, b; x) = \frac{\pi}{\text{sen } \pi b} \left[\frac{M(a, b; x)}{(a-b)!(b-1)!} - \frac{M(a-b+1, 2-b; x)x^{1-b}}{(1-a)!(1-b)!} \right] \quad (11)$$

Assim, a função de onda na região externa ao DQ ($r > R$) será,

$$\phi(\zeta) = B e^{-\zeta/2} \zeta^{|m|} U(|m| + 1/2 - \lambda_1, 2|m| + 1; \zeta) \quad (12)$$

Os parâmetros ξ , ζ , λ e λ_1 são determinados de modo a satisfazerem as condições de continuidade da função de onda e conservação da corrente na interface do DQ ($r = R$). A equação transcendental resultante da aplicação destas condições é

$$\frac{M'}{M} - \frac{\lambda}{\lambda_1} \frac{U'}{U} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_1} \right) + |m| \left(\frac{1}{\xi} - \frac{\lambda}{\lambda_1 \zeta} \right) = 0 \quad (13)$$

onde M' e U' denotam, respectivamente, a derivada primeira das funções M e U com relação a x .

Os diversos níveis de energias serão denotados por $E_{mn} = -1/\lambda_{mn}^2$, onde m é um número inteiro associado ao estado quântico do elétron e n é a n -ésima raiz da equação (13).

3. Método Numérico e Resultados Obtidos

A função Hipergeométrica confluyente possui uma singularidade no infinito, o que significa que para alguns parâmetros, pode haver um comportamento altamente oscilatório ou exponencialmente decrescente. Quando a energia for negativa, as raízes da equação (13) serão números reais e quando a energia for positiva, as raízes serão números imaginárias. Determinando-se os intervalos que possuem as raízes, essas podem ser calculadas utilizando-se o método da bissecção [6], que apesar de apresentar uma convergência linear, tem a virtude de sempre convergir para a raiz da equação, desde que o intervalo de partida escolhido contenha a raiz.

Primeiramente consideraremos o caso de energias positivas e, neste caso, as raízes obtidas serão imaginárias ($\lambda_{mn} = i\eta_{mn}$). Isto é um complicador a mais, já que a equação (13), que é de difícil solução, terá parâmetros complexos.

A Figura 1 mostra o comportamento das partes real e imaginária da equação (13) para um disco quântico de raio 200 Å para $m = 0$ (primeira subbanda de energia), correspondendo a energias positivas. Observa-se que as raízes da equação estão muito próximas de singularidades, o que torna difícil os seus cálculos. Como estamos interessados em calcular as energias partindo da energia fundamental, que é a menor energia em valor absoluto, a este valor corresponderá o maior valor de η_{mn} . Em nossos cálculos, portanto, encontraremos os valores de η_{mn} , ordenados em ordem decrescente, o que corresponde a valores de energias em ordem crescente, em valores absolutos.

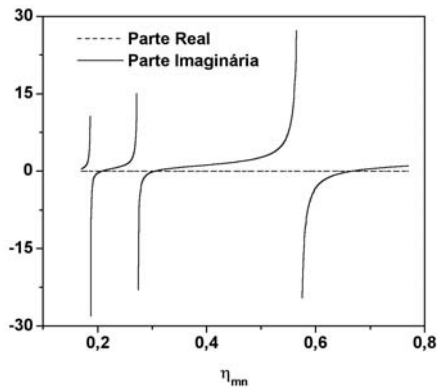


Figura 1: Parte real e imaginária da equação (13), para um disco quântico de raio 200 Å, para $m = 0$.

A Figura 2 mostra o comportamento das partes real e imaginária da função hipergeométrica confluyente $M(|m|+1/2-i\eta, 2|m|+1; \xi)$, em função do parâmetro η para o mesmo ponto quântico, para $m = 0$. As raízes da equação $M(0,5-i\eta, 1; \xi) = 0$ são os pontos em que as partes real e imaginária se anulam simultaneamente, correspondendo, na região mostrada, aos valores de η iguais a $\eta_1 = 0,570$, $\eta_2 = 0,273$ e $\eta_3 = 0,186$, que são, respectivamente, a primeira, a segunda e a terceira raiz. Observa-se que estes valores de η correspondem às singularidades apresentadas na Figura 1. A notação η_i , portanto, se refere à i -ésima raiz da função M , em ordem decrescente, correspondendo à i -ésima singularidade da equação (13).

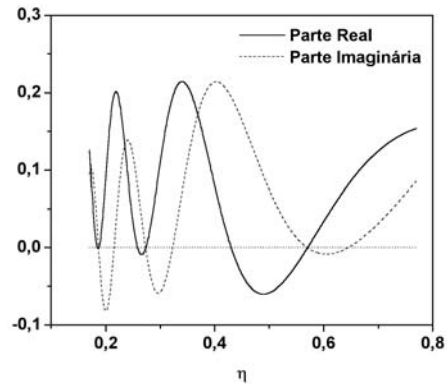


Figura 2: Parte real e imaginária da função hipergeométrica confluyente $M(0,5-i\eta, 1; \xi)$, em função do parâmetro η , para um DQ de raio 200 Å.

No cálculo de n raízes da equação (13), partimos assumindo um intervalo $[\eta_i, \eta_s]$ que contém a raiz de maior valor. O valor inferior do intervalo é tomado como $\eta_i = \eta_1 + \epsilon$, onde ϵ é um valor muito pequeno. O valor superior do intervalo, η_s , é qualquer valor maior que a raiz. A primeira raiz da equação (13), η_{01} , pode então ser calculada pelo método da bissecção, utilizando-se a parte real da função e verificando, para o valor encontrado, se a parte imaginária se anula, ou vice-versa. A segunda raiz, η_{02} , é calculada utilizando-se o intervalo $[\eta_2 + \epsilon, \eta_1 - \epsilon]$, e assim por diante, até a n -ésima raiz, η_{0n} , onde é utilizado o intervalo $[\eta_n + \epsilon, \eta_{n-1} - \epsilon]$. As três primeiras raízes encontradas usando este método foram $\eta_{01} = 0,668$, $\eta_{02} = 0,305$ e $\eta_{03} = 0,208$.

No caso de energias negativas a equação (13) apresentará no máximo uma raiz real. Dependendo do raio do DQ poderá acontecer de não haver raiz real.

Para um DQ de 200 Å de raio e para o estado $m = 0$ apresentamos na Figura 3 a raiz real da equação (13), que é $\lambda_{00} = 0,501$. Para este mesmo DQ é mostrada, na Figura 4, a raiz da equação transcendental $M(0,5-\lambda, 1; \xi) = 0$ que é $\lambda = 0,502$, sendo este valor correspondente à descontinuidade mostrada na Figura 3.

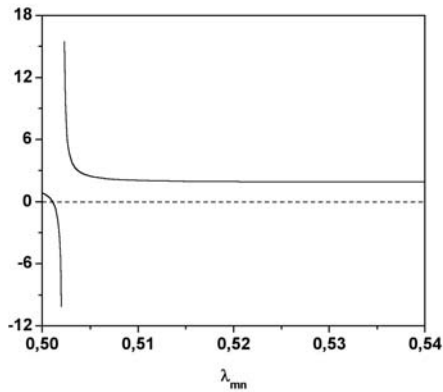


Figura 3: Única raiz real da equação (13), para um disco quântico de raio R , composto de GaAs e envolto por $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Obtivemos as funções de onda (autofunções) dos estados de impureza, que são escritas em termos das funções hipergeométricas de primeira e segunda espécies. Impondo as devidas condições de continuidade e contorno obtivemos uma equação transcendental dada na equação (13). Encontramos as raízes dessa equação para energias positivas e negativas para um DQ de raio 200 \AA e para o estado fundamental $m = 0$. Calculamos também a energia da impureza em função do raio do DQ para o estado fundamental.

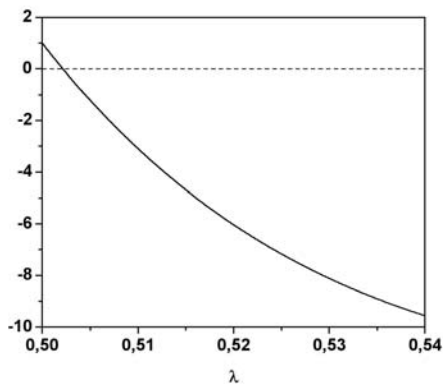


Figura 4: Único zero real da função hipergeométrica confluyente $M(0,5-\lambda,1;\xi)$, correspondente à descontinuidade na Figura 3.

Para o cálculo da energia dos estados da impureza doadora presente no centro do DQ em função do raio do disco, escolhemos os valores do parâmetro λ_{mn} que satisfazem às condições físicas. Verificamos a presença de estados ligados (região de energias negativas) para DQ com raios superiores a 55 \AA , como podemos ver na Figura 5.

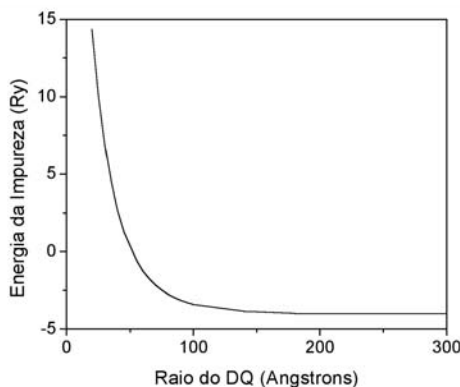


Figura 5: Energia da impureza em função do raio do disco quântico, para $m = 0$ (estado fundamental).

Nessa figura também pode ser observado que, à medida que o raio do DQ cresce, o valor da energia da impureza aproxima-se do valor da energia do

estado fundamental de um átomo de hidrogênio bidimensional, que vale $-4Ry$, como era esperado [4,5]. Para discos quânticos com raios inferiores a 55 \AA os estados de energia da impureza são positivos e apresentam apenas uma única raiz imaginária. O raio de Bohr efetivo e o Rydberg efetivo utilizados nesses cálculos foram $a_0 = 98,7 \text{ \AA}$ e $Ry = 5,83 \text{ meV}$, respectivamente.

4. Conclusões

Neste trabalho resolvemos a equação de Schrödinger para o problema de uma impureza doadora hidrogenóide localizada no centro de um disco quântico (DQ) circular de raio R , composto de GaAs e envolto por $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Obtivemos as funções de onda (autofunções) dos estados de impureza, que são escritas em termos das funções hipergeométricas de primeira e segunda espécies. Impondo as devidas condições de continuidade e contorno obtivemos uma equação transcendental dada na equação (13). Encontramos as raízes dessa equação para energias positivas e negativas para um DQ de raio 200 \AA e para o estado fundamental $m = 0$. Calculamos também a energia da impureza em função do raio do DQ para o estado fundamental.

5. Agradecimentos

Agradecemos à Fundação de Apoio a Pesquisa, FUNAPE – UFG, e à Pró-Reitoria de Pós-Graduação – UCG pelo suporte financeiro.

Referências

- [1] M. Abramowitz e I. A. Segun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover, New York, 1968.
- [2] G. Arfken, "Mathematical Methods for Physicists", Academic Press, New York, 1971.
- [3] R.S.D. Bella and K. Navaneethkrishnan, Donor binding energies and spin-orbit coupling in a spherical quantum dot, *Solid State Commun.* 130 (2004) 773-776.
- [4] F. A. P. Osório, O. Hipólito e F. M. Peeters, Effects of confinement on shallow impurities in GaAs-AlGaAs quantum dots, *Material Res. Soc.*, 281 (1993) 79-84.
- [5] F. A. P. Osório, A. B. A. Marques, P. C. M. Machado e A. N. Borges, The effects of magnetic field on the energy levels of shallow donor impurities in GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum dots, *Microelectronics Journal*, 36 (2005) 244-246.
- [6] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery, "Numerical Recipes in Fortran", Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [7] F. J. Ribeiro and A. Latgé, Impurities in a quantum dot: A comparative study, *Phys. Rev.* B50, (1994) 4913-4916.