

Poço Quântico Duplo de Semicondutores

Prof. Dr. Cássio Sanguini Sergio

Departamento de Física, Universidade Federal de Roraima

Boa Vista, 06 de abril de 2020

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Os elementos de trabalho	3
3	A equação da energia	5
3.1	A expressão de P/Q	6
3.2	A expressão de \bar{P}/\bar{Q}	7
4	A energia de confinamento	8
4.1	Um exemplo com números	9
5	Do duplo para o simples	11

1 Introdução

O artigo Poço Quântico Duplo: 1-Elétron, 2-Poços mostra como determinar a energia de um elétron confinado em um poço quântico duplo, mas, com uma simplificação: O objeto de estudo é desprovido de material. O elétron é tratado como estando no vácuo, sob a ação de um potencial que corta o espaço na forma de poço duplo.

Neste artigo, o **poço quântico duplo** (DQW) é formado por **materiais semicondutores**, quer dizer, o potencial se torna ativo por causa de heterocamadas semicondutoras.

A resolução do poço quântico duplo crescido com materiais semicondutores se fundamenta na **aproximação da massa efetiva** e na **aproximação da função envelope**. Ademais, necessita saber os valores das profundidades dos poços e os valores das massas efetivas das camadas semicondutoras. Estes assuntos são introduzidos no capítulo 10 do livro Confinamento e Espalhamento por Potenciais Retangulares, sob o tema: O Poço Retangular Finito de Semicondutores.

Outra coisa necessária é saber escrever as condições de continuidade (CC) da função de onda ao longo da heteroestrutura (ver a seção 10.4 do Livro). As CC em semicondutores diferem do caso do elétron no vácuo, pois, quando o elétron muda de uma “camada vazia” para outra “camada vazia”, sua massa não se altera, permanece com o valor $m = 9,11 \times 10^{-31}$ kg. Por outro lado, em heteroestruturas semicondutoras, a massa efetivada do elétron (m^*) no poço (P) *é diferente* da massa efetiva do elétron na barreira (B). Por exemplo, numa interface P/B = GaAs/AlAs, a massa efetiva da banda de condução do GaAs é $m_P^* = 0,067 \times 9,11 \times 10^{-31}$ kg, e a massa efetiva da banda de condução do AlAs é $m_B^* = 0,150 \times 9,11 \times 10^{-31}$ kg (Adachi, 1985). Por isso, as CC dependem da massa efetiva dos semicondutores que integram a interface. Para certa interface P/B, localizada na posição $x = \ell$, as CC se escrevem:

$$\begin{aligned} \psi_P(\ell) &= \psi_B(\ell), \\ \frac{1}{m_P^*} \frac{d\psi_P(\ell)}{dx} &= \frac{1}{m_B^*} \frac{d\psi_B(\ell)}{dx}. \end{aligned} \quad (1)$$

Analisando a Eq. (1), é fácil de entender as CC para o caso de “camadas vazias”:

$$\begin{aligned} \psi_P(\ell) &= \psi_B(\ell), \\ \frac{1}{m} \frac{d\psi_P(\ell)}{dx} &= \frac{1}{m} \frac{d\psi_B(\ell)}{dx}. \end{aligned} \quad (2)$$

2 Os elementos de trabalho

O poço quântico duplo de semicondutores é formado por 2-poços retangulares separados por 1-barreira central. Neste artigo, os poços são considerados com potencial negativo, $V(x) = -V_0$, e as barreiras laterais e central, com potencial igual a zero, $V(x) = 0$.

A Fig. 1 mostra o perfil do potencial ao longo das camadas do DQW. Observe, com atenção, a peça de função de onda e a massa efetiva de cada camada e, também, o número de onda associado à peça de função de onda. Ademais, perceba que a largura da barreira central é designada por b e a largura do poço individual, por w .

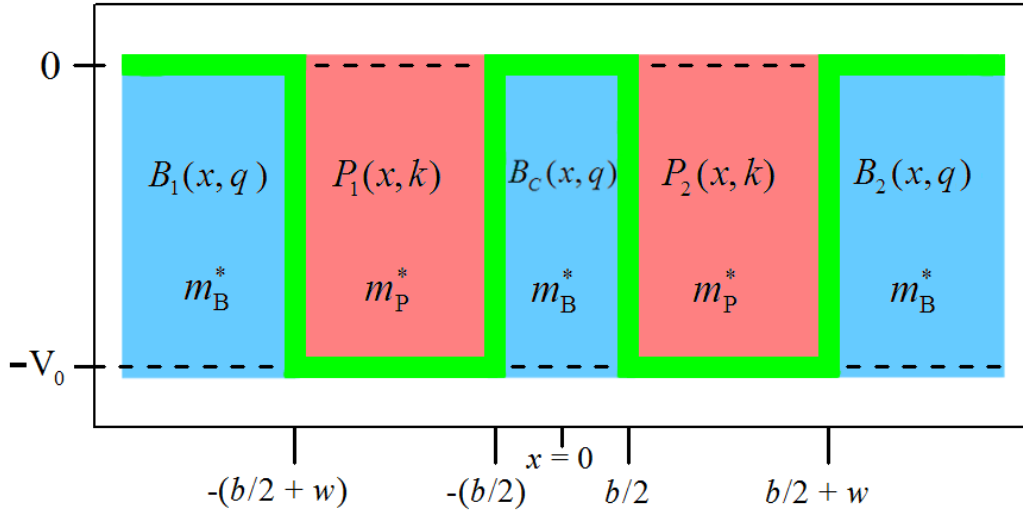


Figura 1: Poço duplo de semicondutores: Perfil de potencial; peças de função de onda; massas efetivas; números de onda; camadas.

Na região dos poços, o número de onda é real:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_P^*(E + V_0)}. \quad (3)$$

Na região das barreiras (central, barreira-1 e barreira-2), a combinação de potencial nulo com energia de partícula negativa produz número de onda imaginário:

$$k^{\text{img}} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_B^*(E - 0)}, \quad (4)$$

sendo conveniente escrevê-lo na forma

$$k^{\text{img}} = iq, \quad (5)$$

onde

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_B^*(0 - E)}. \quad (6)$$

Mais esclarecimentos sobre a notação: Uma função de onda de caráter *ímpar* será marcada com uma *barra*; as posições negativas ($x < 0$) e positivas ($x > 0$) serão representadas por x_- e x_+ , nesta ordem; as funções elementares serão escritas no padrão Latex: **sin** para seno, **cos** para cosseno, **tan** para tangente, **cot** para cotangente, **cosh** para cosseno hiperbólico, **sinh** para seno hiperbólico e **exp** para exponencial.

O DQW 1 é simétrico em relação à origem das posições ($x = 0$). Logo, sua função de onda é par (Ψ) ou ímpar ($\bar{\Psi}$), sendo:

$$\begin{aligned} \Psi(x_-) &= +\Psi(x_+), \\ \bar{\Psi}(x_-) &= -\bar{\Psi}(x_+). \end{aligned} \quad (7)$$

A função de onda par é formada pelas seguintes peças:

$$\begin{aligned} B_1(x_-) &= B_2(x_+), \\ P_1(x_-) &= P_2(x_+), \\ B_c(x_-) &= B_c(x_+), \\ B_c(x_+) &= B \cosh[qx_+], \\ P_2(x_+) &= P \cos[kx_+] + Q \sin[kx_+], \\ B_2(x_+) &= D \exp[-qx_+]. \end{aligned} \quad (8)$$

E as peças da função de onda ímpar são:

$$\begin{aligned}
\bar{B}_1(x_-) &= -\bar{B}_2(x_+), \\
\bar{P}_1(x_-) &= -\bar{P}_2(x_+), \\
\bar{B}_c(x_-) &= -\bar{B}_c(x_+), \\
\bar{B}_c(x_+) &= \bar{B} \sinh[qx_+], \\
\bar{P}_2(x_+) &= \bar{P} \cos[kx_+] + \bar{Q} \sin[kx_+], \\
\bar{B}_2(x_+) &= \bar{D} \exp[-qx_+].
\end{aligned} \tag{9}$$

3 A equação da energia

Esta seção apresenta o procedimento que leva à equação capaz de fornecer os valores da energia de confinamento do elétron, uma equação cujas raízes podem ser determinadas com auxílio gráfico, denominada equação transcendental.

Todo trabalho se resume em aplicar as CC (1) na interface P_2/B_2 :

Primeiro, escreve-se $P_2(x) = B_2(x)$ para $x = b/2 + w$:

$$P \cos[k(b/2 + w)] + Q \sin[k(b/2 + w)] = D \exp[-q(b/2 + w)]. \tag{10}$$

Segundo, escreve-se as seguintes derivadas:

$$\begin{aligned}
P'_2(x) &= -kP \sin[kx] + kQ \cos[kx], \\
B'_2(x) &= -qD \exp[-qx].
\end{aligned} \tag{11}$$

Terceiro, escreve-se $m_B^* P'_2(x) = m_P^* B'_2(x)$ para $x = b/2 + w$:

$$-P \sin[k(b/2 + w)] + Q \cos[k(b/2 + w)] = -\frac{qm_P^*}{km_B^*} D \exp[-q(b/2 + w)]. \tag{12}$$

Quarto, divide-se a Eq. (12) pela Eq. (10):

$$\frac{-P \sin[k(b/2 + w)] + Q \cos[k(b/2 + w)]}{P \cos[k(b/2 + w)] + Q \sin[k(b/2 + w)]} = -\frac{qm_P^*}{km_B^*}. \tag{13}$$

Quinto, manipula-se a Eq. (13) até chegar no agrupamento dos senos e os cossenos:

$$-Q \sin[k(b/2 + w)] \left[1 - \frac{km_B^* P}{qm_P^* Q} \right] = P \cos[k(b/2 + w)] \left[1 + \frac{km_B^* Q}{qm_P^* P} \right]. \quad (14)$$

Sexto, utiliza-se a definição de tangente:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(P/Q) \frac{\left[1 + \frac{km_B^* Q}{qm_P^* P} \right]}{\left[1 - \frac{km_B^* P}{qm_P^* Q} \right]}. \quad (15)$$

Disparando o gráfico da equação (15), a energia de confinamento é determinada fixando atenção no cruzamento que a curva tangente faz com a curva da expressão à direita.

Das variáveis da Eq. (15), ainda resta saber a forma de P/Q . Haverá uma expressão para a função de onda par e outra para a função de onda ímpar.

3.1 A expressão de P/Q

Esta seção determina a expressão de P/Q — a vinculação é com a função de onda par.

Exame das CC (1) na interface P_2/B_c :

Primeiro, escreve-se $P_2(x) = B_c(x)$ para $x = b/2$:

$$P \cos[k(b/2)] + Q \sin[k(b/2)] = B \cosh[q(b/2)]. \quad (16)$$

Segundo, escreve-se as seguintes derivadas:

$$\begin{aligned} P_2'(x) &= -kP \sin[kx] + kQ \cos[kx], \\ B_c'(x) &= qB \sinh[qx]. \end{aligned} \quad (17)$$

Terceiro, escreve-se $m_B^* P_2'(x) = m_P^* B_c'(x)$ para $x = b/2$:

$$P \sin[k(b/2)] - Q \cos[k(b/2)] = -\frac{qm_P^*}{km_B^*} B \sinh[q(b/2)]. \quad (18)$$

Quarto, multiplica-se a Eq. (16) por $\cos[k(b/2)]$:

$$P \cos^2[k(b/2)] + Q \sin[k(b/2)] \cos[k(b/2)] = B \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]. \quad (19)$$

Quinto, multiplica-se a Eq. (18) por $\sin[k(b/2)]$:

$$P \sin^2[k(b/2)] - Q \cos[k(b/2)] \sin[k(b/2)] = -\frac{qm_P^*}{km_B^*} B \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]. \quad (20)$$

Sexto, lembrando que $\cos^2 + \sin^2 = 1$, soma-se das Eqs. (19) e (20):

$$P = B \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \frac{qm_P^*}{km_B^*} B \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]. \quad (21)$$

Sétimo (adaptação dos passos 4, 5 e 6), multiplica-se a Eq. (19) por $\sin[k(b/2)]$, multiplica-se a Eq. (20) por $\cos[k(b/2)]$, soma-se os resultados:

$$Q = B \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \frac{qm_P^*}{km_B^*} B \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]. \quad (22)$$

Oitavo, divide-se a Eq. (21) pela Eq. (22):

$$P/Q = \frac{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (23)$$

3.2 A expressão de \bar{P}/\bar{Q}

Esta seção trata da expressão de \bar{P}/\bar{Q} — a vinculação é com a função de onda ímpar.

Segue-se os passos da seção [3.1], mas, com esta adequação: A função de onda dentro da barreira-central, agora, é ímpar, por isso, é escrita como **seno hiperbólico** – compare as Eqs. (8) com as Eqs (9). Então, é fácil mostrar que:

$$\bar{P}/\bar{Q} = \frac{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (24)$$

4 A energia de confinamento

A determinação da energia — de elétron confinado em poço quântico duplo — lança mão da equação transcendental desenvolvida na seção [3] e das equações de apoio elaboradas nas seções [3.1] e [3.2]. Vamos, então, agrupá-las nesta seção.

Equações de função de onda par:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(P/Q) \frac{\left[1 + \frac{km_B^* Q}{qm_P^* P}\right]}{\left[1 - \frac{km_B^* P}{qm_P^* Q}\right]}, \quad (25)$$

$$P/Q = \frac{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (26)$$

Equações de função de onda ímpar:

$$\tan[k(b/2 + w)] = -(\bar{P}/\bar{Q}) \frac{\left[1 + \frac{km_B^* \bar{Q}}{qm_P^* \bar{P}}\right]}{\left[1 - \frac{km_B^* \bar{P}}{qm_P^* \bar{Q}}\right]}, \quad (27)$$

$$\bar{P}/\bar{Q} = \frac{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \sinh[q(b/2)] \cos[k(b/2)] - \cosh[q(b/2)] \sin[k(b/2)]}{\frac{km_B^*}{qm_P^*} \sinh[q(b/2)] \sin[k(b/2)] + \cosh[q(b/2)] \cos[k(b/2)]}. \quad (28)$$

O método requer varredura na energia do elétron, que é negativa, e está declarada nos números de onda:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{\text{P}}^*(E + V_0)}, \quad (29)$$

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{\text{B}}^*(-E)}. \quad (30)$$

Como se vê na Fig. 1, para fitar toda série de energia de confinamento, a varredura deve conter os valores de $(-V_0) < E < 0$. Ao invés da inspeção ser realizada com números negativos, é preferível utilizar valores positivos. Para isso, pode-se parametrizar a energia:

$$E = (\eta - 1)V_0, \quad (31)$$

e fazer o parâmetro de energia percorrer os valores de $0 < \eta < 1$.

4.1 Um exemplo com números

Vamos colocar números nas fórmulas!

Este exemplo considera um poço quântico duplo crescido com materiais semicondutores. Os poços são de GaAs e as barreiras são de AlAs, por isso, as massas efetivas nos poços e nas barreiras são $m_{\text{P}}^* = 0,067m_0$ e $m_{\text{B}}^* = 0,150m_0$, nesta ordem, sendo $m_0 = 9,11 \times 10^{-31}$ kg (Adachi, 1985). A geometria é 100-20-100 Å, quer dizer, a largura do poço é $w = 100$ Å e a largura da barreira-central é $b = 20$ Å. E a profundidade do poço é $V_0 = 1,22$ eV (consulte o [Livro](#) para saber determinar esse valor).

As curvas das Eqs. (25) e (27) são apresentadas na Fig. 2.

Os cruzamentos das equações transcendentais revelam os seguintes parâmetros de energia (adimensionais):

$$\begin{aligned} \eta_1 &= 0,03260, \\ \eta_2 &= 0,03298. \end{aligned} \quad (32)$$

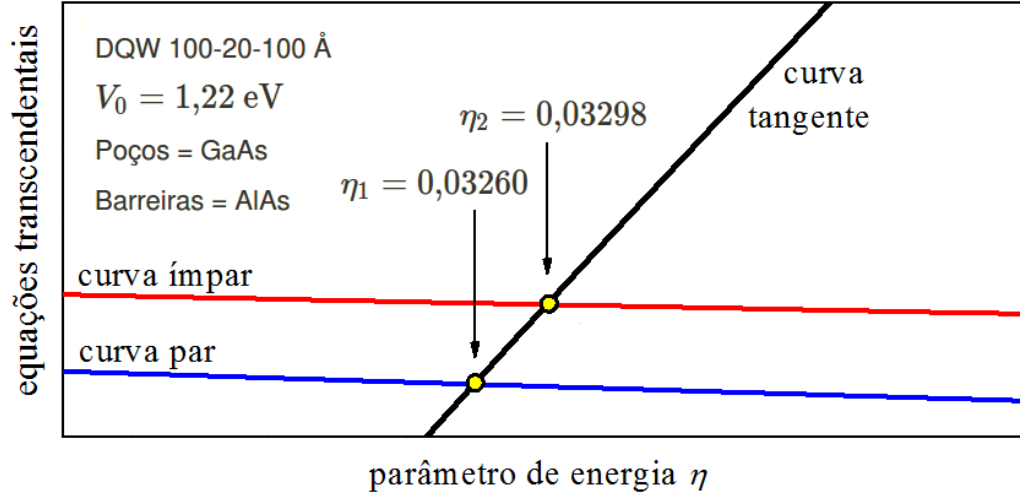


Figura 2: Cruzamentos de equações transcendentais.

Os parâmetros (32) correspondem às seguintes energias de confinamento (eV):

$$\begin{aligned} E_1 &= -1,1802; \\ E_2 &= -1,1798. \end{aligned} \quad (33)$$

O nível de energia é definido como:

$$\epsilon = E + V_0. \quad (34)$$

Então, as energias (33) correspondem aos seguintes níveis de energia (meV):

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= 39,77; \\ \epsilon_2 &= 40,24. \end{aligned} \quad (35)$$

Os resultados indicam que o nível de energia do estado fundamental (ϵ_1) se origina da solução par e que o nível de energia do primeiro estado excitado (ϵ_2) vem da solução ímpar. A diferença de energia entre os níveis de energia (35) é (meV):

$$\epsilon_2 - \epsilon_1 = 0,47. \quad (36)$$

5 Do duplo para o simples

Há uma maneira de transformar a equação transcendental de poço duplo em equação transcendental de poço simples. No limite da barreira desaparecer ($b \rightarrow 0$), o poço duplo se comporta como um poço simples de largura $2w$ — caso $w = L/2$, vai se comportar como um simples de largura L .

O procedimento é bem elementar, consiste em substituir $w = L/2$ e $b = 0$ nas Eqs. (25) e (27).

Transformação da Eq. (25):

$$\tan[k(L/2)] = - \frac{\left[1 + \frac{km_B^* Q}{qm_P^* P}\right]}{\left[(Q/P) - \frac{km_B^*}{qm_P^*}\right]}. \quad (37)$$

Agora, a substituição de $b = 0$ na equação de apoio (26) resulta em $(Q/P) = 0$, que por sua vez, levado à Eq. (37), culmina em:

$$\tan[k(L/2)] = \frac{qm_P^*}{km_B^*}. \quad (38)$$

Transformação da Eq. (27):

$$\tan[k(L/2)] = - \frac{\left[(\bar{P}/\bar{Q}) + \frac{km_B^*}{qm_P^*}\right]}{\left[1 - \frac{km_B^* \bar{P}}{qm_P^* \bar{Q}}\right]}. \quad (39)$$

Agora, a substituição de $b = 0$ na equação de apoio (28) resulta em $(\bar{P}/\bar{Q}) = 0$, que por sua vez, levado à Eq. (39), culmina em:

$$\cot[k(L/2)] = - \frac{qm_P^*}{km_B^*}. \quad (40)$$

Referências

Adachi, S. (1985). *GaAs, AlAs, and Al(x)Ga(1-x)As: Material parameters for use in research and device applications*. Journal of Applied Physics, Volume 58 (3), R1.