



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fios Quânticos *Core-Shell* com Efeito de Potencial de Carga
Imagem

Ariel Adorno de Sousa

10 de Fevereiro de 2012



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fios Quânticos *Core-Shell* com Efeito de Potencial de Carga
Imagem

Ariel Adorno de Sousa

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira*

Co-Orientador: *Prof. Dr. Andrey Chaves*

Dados Internacionais de Catalogação na Fonte

S725f Sousa, Ariel Adorno de.
Fios quânticos *Core-Shell* com efeito potencial de carga de carga imagem /
Ariel Adorno de Sousa. -- 2012.
xvi, 79f. color. ; 30 cm: (Incluem figuras e tabelas)

Orientador: Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira.
Dissertação (mestrado) -- Universidade Federal de Mato Grosso, Instituto de
Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Cuiabá, 2012.

Bibliografia: f. 75-79

1. Semicondutores. 2. Fios quânticos. 3. Heteroestruturas. I. Título.

CDU 537.31

Catalogação na fonte: Maurício Silva de Oliveira- Bibliotecário CRB/1-1860.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Avenida Fernando Corrêa da Costa, 2367 - Boa Esperança - Cep: 78060900 - CUIABÁ/MT
Tel : 615-8734 - Email : pgf@fisica.ufmt.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

TÍTULO : "Fios Quânticos Core-Shell com Efeito de POTencial de Carga Imagem"

AUTOR : Mestrando Ariel Adorno de Sousa

Dissertação defendida e aprovada em 10/02/2012.

Composição da Banca Examinadora:

Presidente Banca / Orientador Doutor 
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Examinador Interno Doutor 
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Examinador Interno Doutor 
Instituição : UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO

Examinador Externo Doutor 
Instituição : Universidade Federal do Ceara

CUIABÁ, 10/02/2012.

"Ora, a fé é o firme fundamento das coisas que se esperam, e a prova das coisas que se não veem"

Hebreus 11:1

*"Triste época! Mais fácil desintegrar
um átomo do que um preconceito"*

Albert Einstein (1876 - 1955)

Agradecimentos

- Agradeço a Deus que está sobre todas as coisas e que é o verdadeiro regente deste universo ainda desconhecido para os humanos;
- Agradeço as pessoas que acreditaram na ousadia da realização deste trabalho. Sem elas seria impossível;
- À minha querida e amável Juliana pela compreensão e auxílio nos textos;
- Ao professor Teldo Anderson pela confiança, competência e dedicação. Por ter a paciência de orientar-me nestes anos de mestrado e graduação e pela boa amizade;
- Ao professor Andrey Chaves da UFC, pelas discussões extremamente eficazes e por sua valiosa contribuição a este trabalho;
- Aos meus colegas de trabalho, Thiago Bonelli (Robin), Ana Paula, Izabela, João Valim, José Filho e Rodrigo Pereira, pelo apoio moral e psicológico;
- Aos professores do Instituto de física da UFMT, em especial aos professores, Alberto, Jorge Luiz (Hulk), Harold Blas, Ricardo e Romildo, pela importante contribuição que deram para minha formação acadêmica, tanto através das disciplinas na pós-graduação bem como discussões sobre minhas pesquisas;
- Aos meus amigos da UEG e em especial ao professor Jair Júnior pelos bons conselhos e momentos de distrações únicos;
- À secretária Dulce pela boa amizade e por suas contribuições pelo bom andamento do Programa de Pós-graduação em Física;
- Ao professor Sérgio e a todo grupo administrativo do Instituto de Física da UFMT, pelo esforço incondicional para o desenvolvimento destas instituição;
- À minha família, principal fonte de inspiração, motivação e respeito, fundamentando os meus princípios;
- À Thamyres, minha linda filha;
- À CAPES e a UFMT pelo apoio financeiro.

Conteúdo

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiv
Resumo	xv
Abstract	xvi
Abreviaturas	xvii
1 Introdução	1
1.1 Breve Histórico	1
1.2 Bandas de Energia	3
1.3 Aproximação Adiabática	4
1.4 Aproximação da Função Envelope	9
1.5 Fios Quânticos	10
1.6 Potencial de Confinamento	14
1.7 <i>Excitons</i>	15
1.8 Efeito Aharonov-Bohm	16
1.9 Escopo e objetivo da Dissertação	18
2 Modelo Teórico	19
2.1 Introdução	20
2.2 Hamiltoniano do Exciton	20
2.3 Hamiltoniano do portador com campo magnético na direção do eixo \mathbf{z}	25
2.4 Método Variacional	27
2.5 Solução numérica da equação de Schrödinger bidimensional	29
3 Confinamento Interfacial em fios quânticos <i>core-shell</i> com altas constantes dielétricas	34
3.1 Introdução	35
3.2 Fios quânticos semicondutores com efeito de potencial de auto energia	35
3.3 Condições físicas para o confinamento interfacial	44

4	Exciton em fios quânticos <i>core-shell</i> com efeito de potencial de carga imagem	49
4.1	Introdução	50
4.2	Potenciais de interação devido as cargas imagens	51
4.3	Resultados	53
5	Conclusões e perspectivas	58
A		60
A.1	Potencial de Auto Energia	60
	Referências Bibliográficas	75

Lista de Figuras

1.1	(a) Os cientistas John Bardeen (em pé a esquerda), Walter Houser Brattain (em pé a direita) e William Bradford Shockley (sentado) em um laboratório - (b)- Primeiro Transistor produzido com base em semicondutores na história da tecnologia fabricado por Bardeen, Brattain e Houser e (c) Primeiro Circuito Integrado produzido e desenvolvido por Jack S. Kilby, ambos em meados do século passado. [1].	1
1.2	Representação gráfica da lei de Moore. A duplicação do poder de processamento em um circuito integrado ocorre a cada dois anos. [3].	2
1.3	Importantes aplicações tecnológicas de semicondutores. Esquerda, fonte de laser multicores e direita, processador intel xeon com seis núcleos físicos. Crédito de [10]	3
1.4	(a) Formação das bandas de energia devido à aproximação de um grande número de átomos em um sólido semiconductor (b) Bandas de energia em um semiconductor. As regiões hachuradas ilustram a ocupação dos elétrons com $T > 0K$	4
1.5	Representação esquemática do potencial de uma heterojunção ao longo da direção ρ , onde E_{gc} é o <i>gap</i> na região do <i>core</i> e E_{gs} é o <i>gap</i> na região da <i>shell</i> , ΔE_{el} é o potencial que confina elétrons e ΔE_h é o potencial que confina buracos.	9
1.6	A esquerda - Fio quântico <i>Core-Shell</i> e a direita - Corte em perspectiva de um nanofio no plano de confinamento, abaixo perfil do potencial ao longo de ρ	11
1.7	Fios Quânticos (a) Imagem SEM para o material GaAs com o raio do fio igual à 50 nm crescidos com técnicas LCG, [41](b) Imagem SEM para o material GaP com o raio do fio igual à 50 nm crescidos com técnicas LCG, [41] (c) Imagem TSEM para o nanofio AlGaAs, crescimento perpendicular de Al (Alumínio), Ga (Gálio), As (Arsênio) e O (Oxigênio), respectivamente, barra de referência igual a 50 nm crescido com técnicas MBE, [42] e (d) Imagem de AFM de um nanofio de Si sobre o substrato de Au (Ouro) com raio de 10 nm crescidos com técnicas VLS, [35]	12

1.8	(a) Esquema de montagem de um nanofio em 3D (corte ao longo da direção da largura do canal do fio quântico) nanofio de Si coberto com uma camada de óxido, funcionando com armadilha para o elétron, (b) Microscopia eletrônica de transmissão da seção transversal em nanofio de Si, (c) Fio quântico <i>Core-Shell</i> de Ge/Si, respectivamente, com efeito de dopagem (d) Imagem de TEM de um fio <i>Core-Shell</i> de Ge/a-Si (Germânio com silício amorfo) na parte superior, e Ge/c-Si (Germânio com carbeto de silício) na parte inferior, (e) Imagem HRTEM de Ge/a-Si para um semiconductor do tipo-n (f) Imagem HRTEM de Ge/c-Si para um semiconductor do tipo-n e (g) Esquema de montagem de um nanofio tipo-n de Ge/c-Si. [11, 12].	13
1.9	- Representação do exciton de Wannier - Mott, e exciton de Frenkel.	16
1.10	Ilustração da experiência proposta por Aharonov-Bohm. Entre duas fendas é aplicado um campo magnético \mathbf{B} , sendo diferente de zero somente na região interna ao campo aplicado, porém o potencial vetor (indicado pelas linhas sólidas) é diferente de zero em todo o espaço, com simetria cilíndrica, causando efeitos opostos no caminho 1 e 2.	17
2.1	Esquema representativo de um fio quântico <i>core-shell</i> com interface abrupta, com mobilidade eletrônica ocorre longo do eixo z	20
2.2	Coordenadas do centro de massa do exciton	22
2.3	Função de onda no estado fundamental de um elétron em um nanofio circular de raio $R=20 \text{ nm}$, para varios valores de campos magnéticos B	26
2.4	<i>grid</i> da função de onda, onde h é o tamanho de cada passo numérico e i é o ponto de referência dos valores espaciais.	30
3.1	Perfil do potencial de confinamento em fios quânticos $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, Si/SiO_2 , GaN/HfO_2 e Si/HfO_2 , linhas azuis - projeções das funções de onda dos portadores.	37
3.2	Energia dos portadores em fios Si/SiO_2 (esquerda) e Si/HfO_2 (direita). As linhas sólidas e tracejadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, com efeito do potencial de auto energia. Os símbolos \circ e Δ representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, sem efeito do potencial de auto energia.	38
3.3	Energia dos portadores em fios $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$. As linhas sólidas e tracejadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, com efeito do potencial de auto energia. Os símbolos \circ e Δ representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, sem efeito do potencial de auto energia.	39
3.4	Esquerda: Estado fundamental dos portadores em fio <i>core-shell</i> GaN/HfO_2 . Direita: Funções de onda normalizadas de el , lh e hh para raios de fios entre 15 e 40 nm	40

- 3.5 (a) Funções de onda em GaN/HfO₂ com raio (a) R = 20 nm e (b) R = 40 nm, elétron (linha sólida preta), buraco leve (linha tracejada vermelha), buraco pesado (linha tracejada azul) com efeito de carga imagem e elétron (traceja ponto amarelo), buraco leve (tracejado violeta) e buraco pesado (pontilhados cinza) sem efeito de carga imagem. 40
- 3.6 Superposição das funções de onda do (a): elétron-buraco leve (b): elétron-buraco pesado, confinado em fios GaN/HfO₂, (linhas sólidas), com efeito do potencial de auto energia e (símbolo Δ) sem efeito do potencial de auto energia. 42
- 3.7 Efeito do potencial de auto energia para a energia de recombinação do par (a) elétron-buraco leve e (b) elétron-buraco pesado, para diferentes raios do fio, 4 nm (\times), 6 nm (\bullet), 8 nm (Δ) e 10 nm (\star). 42
- 3.8 Energia de recombinação elétron-buraco pesado (linha sólida preta) e elétron-buraco leve (linha tracejada vermelha) em função do raio com fio, com efeito do potencial de auto energia $\Sigma_{e,h}$ 43
- 3.9 Energia dos portadores em função do campo magnético para o fio GaN/HfO₂ com raio R = 30 nm, com (esquerda) e sem (direita) efeito do potencial de auto energia. 44
- 3.10 (a) Valor esperado relativo da posição do buraco pesado em função de ε_r , para potencial de confinamento ΔE_h igual a 0.4 eV ($-\star-$), 0.6 eV ($-\bullet-$) e 0.8 eV ($-\Delta-$). (b) Funções de ondas sem efeito de potencial de auto energia para elétron (linha tracejada), buraco leve (linha traço ponto) e buraco pesado (linha traço ponto ponto). As funções de onda com efeito do potencial de auto energia para elétron, buraco leve e buraco pesado são as linhas sólidas indicadas no gráfico. Valores obtidos para fio com raio R = 10 nm e Si como material na região *core*. 45
- 3.11 (a) Valor esperado relativo da posição do buraco pesado em função de ε_r , para potencial de confinamento ΔE_h igual a 0.4 eV ($-\star-$), 0.6 eV ($-\bullet-$) e 0.8 eV ($-\Delta-$). (b) Funções de ondas sem efeito de potencial de auto energia para elétron (linha tracejada), buraco leve (linha traço ponto) e buraco pesado (linha traço ponto ponto). As funções de onda com efeito do potencial de auto energia para elétron, buraco leve e buraco pesado são as linhas sólidas indicadas no gráfico. Valores obtidos para fio com raio R = 10 nm e GaN como material na região *core*. 45
- 3.12 Energia dos portadores em função do campo magnético do nanofio com Si na região *core*, raio R = 10 nm, com (esquerda) e sem (direita) efeito do potencial de auto energia. 46
- 3.13 Distribuição de energia no estado fundamental do elétron (esquerda) e do buraco leve (direita), para diferentes valores de ΔE e ε_r . Fio quântico com Si na região *core*, com o raio R = 10 nm. 47
- 3.14 Distribuição de energia no estado fundamental do elétron (esquerda) e do buraco pesado (direita), para diferentes valores de ΔE e ε_r . Fio quântico com GaN na região *core*, com o raio R = 10 nm. 47
- 4.1 - Representação esquemática de exciton no diagrama de bandas de energia em um fio quântico com exciton confinado na região do *core*. 51

4.2	Representação gráfica das possíveis localizações dos portadores no fio quântico (a) - Elétron e buraco no <i>Core</i> , suas imagens no <i>Shell</i> , (b) Elétron e buraco no <i>Shell</i> e suas imagens no <i>Core</i> , (c) Elétrons no <i>Core</i> suas imagens no <i>Shell</i> , buraco no <i>Shell</i> e suas no <i>Core</i> e (d) Elétron no <i>Shell</i> suas imagens no <i>Core</i> e buraco no <i>Core</i> e suas imagens no <i>Shell</i>	52
4.3	Diagrama esquemático das interações entre os portadores e as cargas imagens quando (a) $\varepsilon_r < 1$ e (b) $\varepsilon_r > 1$	53
4.4	Diferença entre as aproximações AP1 e AP2 em relação a aproximação AP0 para o valor absoluto da energia de ligação <i>el-lh</i> e <i>el-hh</i> , em função da razão ε_r , para nanofios com $R = 4nm$ (lado esquerdo) e com $R = 40nm$ (lado direito).	54
4.5	Energia de ligação em função do raio do fio para diferentes materiais, calculada com as aproximações APO (Linha sólida preta), AP1 (●) e AP2 (Δ).	55
4.6	Energia de exciton para os nanofios de GaAs/ZnSe, GaN/HfO ₂ , Si/HfO ₂ e Si/SiO ₂ para os potencial APO (Δ), AP1 (●) e AP2 (Linha preta sólida).	57
A.1	- Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron e o buraco estão na região do <i>core</i> e suas imagens na região do <i>shell</i>	62
A.2	- Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron e o buraco estão na região do <i>shell</i> , e suas imagens na região do <i>core</i>	65
A.3	- Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron está na região do <i>core</i> e o buraco está na região do <i>shell</i> e suas imagens estão respectivamente na região do <i>shell</i> e do <i>core</i>	68
A.4	- Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron está na região do <i>shell</i> e o buraco está na região do <i>core</i> e suas imagens estão respectivamente na região do <i>core</i> e do <i>shell</i>	71

Lista de Tabelas

1.1	- Número de grau de confinamento e o graus de liberdade para diferentes heteroestruturas [28]	14
3.1	- Parâmetros dos materiais: gap de energia em eV , constantes dielétricas, massa efetiva dos elétrons (m_e^{\parallel}), buracos leves (m_{lh}^{\parallel}) e buracos pesados (m_{hh}^{\parallel}) para silício (Si), arseneto de gálio (GaAs), arseneto de gálio alumínio ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As$), óxido de silício (SiO_2) e óxido de háfnio (HfO_2). [68, 69, 70, 71].	36
3.2	razões entre as constantes dielétricas (ϵ_r).	36
3.3	Energia de elétrons e buracos pesados no Estado Fundamental (E.F) e no Primeiro Estado Excitado (1ºE.) em fios <i>core-shell</i> , GaN/ HfO_2 , Si/ HfO_2 , $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ /GaAs e Si/ SiO_2 sem (APO) e com (AP1) efeito do potencial de auto energia.	37
4.1	Comparação da energia de ligação de excitons $el-lh$ e $el-hh$, com diferentes aproximações, para fios estreitos $R = 4\text{ nm}$ e fios largos $R = 18\text{ nm}$	54
4.2	Comparação da energia total de excitons $el-lh$ e $el-hh$, com diferentes aproximações, para fios estreitos $R = 4\text{ nm}$ e fios largos $R = 18\text{ nm}$	57

Resumo

Avanços nas técnicas de crescimento têm tornado possível a fabricação de estruturas semicondutoras unidimensionais em escala nanométrica, chamadas fios quânticos. O interesse nestas estruturas tem crescido bastante, devido a suas aplicações em dispositivos eletrônicos e sua química ser facilmente manipulável. Em particular, investigamos neste trabalho propriedades ópticas e eletrônicas de portadores confinados em fios quânticos *core-shell* Tipo-I levando em consideração as contribuições de potenciais devido a descontinuidade das constantes dielétricas dos materiais do *core* (ϵ_1) e *shell* (ϵ_2). Primeiramente estudamos os efeitos do potencial de auto energia sobre os potenciais de confinamento e estados ligados de portadores e em seguida efeitos de interações de excitons com cargas imagens. O modelo empregado está baseado na aproximação de Born-Oppenheimer e é consistente com o formalismo da teoria da massa efetiva e da função envelope. A equação de Schrödinger independente do tempo que descreve o movimento dos portadores considera a anisotropia da massa efetiva por meio do operador de energia cinética proposto por BenDaniel e Duck. Os resultados obtidos mostram que o efeito do potencial de auto energia modifica fortemente potenciais de confinamento em estruturas com $\epsilon_r < 1$, criando cúspides que atraem portadores para a região interfacial do fio alterando suas propriedades eletrônicas e ópticas, enquanto que em estruturas com $\epsilon_r > 1$ o potencial de confinamento é suavizado nas regiões interfaciais causando um aumento na energia dos portadores. Com o curto espaçamento entre elétrons e buracos devido ao confinamento cilíndrico, a energia de ligação de excitons em fios quânticos é pequena, da ordem de algumas dezenas de meV para os fios estudados neste trabalho, e correções devido a cargas imagens obtidas foram da ordem de algumas unidades de meV.

Abstract

Advances in growth techniques have made possible the fabrication of nanometer-scale one-dimensional semiconductor called quantum wires (NW). The interest in these structures has grown due to its applications in electronics and chemistry easily manipulated. In particular, we investigate optical and electronic properties of carriers confined in type-I core-shell quantum wires taking into account the contributions of the self potential energy due to discontinuity of dielectric constants of the core (ε_1) and shell (ε_2) materials. First, we studied the effects of the self energy potential on the confinement potential and bound states, and then, the effects of the interactions between exciton and image charges. The model used is based on the Born-Oppenheimer approximation and is consistent with the envelope function formalism and the effective mass theory. The time independent Schrödinger equation describing the motion of carriers. Considers the anisotropy of the effective mass through the kinetic energy operator proposed by BenDaniel and Duck. The solution is obtained by numerical discretization techniques based on finite differences. The results show that the effect of self energy potential strongly modifies the electronic structures of the NW by varying the energy of recombination of carriers at several tens of meV . In addition, the ideal model for quantum wires is not valid for structures where $\varepsilon_r < 1$, due to the confinement of carriers in the interfacial region.

Abreviaturas

MOCVD - Metalorganic Chemical vapor deposition

VLS - Vapor liquid solid

ΔE_i - Energia de confinamento do portador i

Γ - Ponto Gamma, centro da primeira zona de Brillouin

μ^\perp - Inverso da massa reduzida perpendicular

ω_c - Frequência de ciclotron

ω_k - Frequência angular

$\phi(\mathbf{R})$ - Função de onda desacoplada

$\Psi(\mathbf{R})$ - Função de onda total

$\psi(\mathbf{R})$ - Função de onda desacoplada

ρ_{in} - Raio do nanofio na região da interface

ρ_{out} - Raio do nanofio na região externa

Σ_i - Potencial de auto-energia do portador i

ε_1 - Constante dielétrica do *core*

ε_2 - Constante dielétrica do *shell*

ε_r - Razão entre as constantes dielétricas, $\varepsilon_1/\varepsilon_2$

$\varphi(\mathbf{R})$ - Função de onda desacoplada

a_0 - Raio de Bohr

E_n - n -ésima energia

m_i^* - Massa efetiva do portador i

m_0 - Massa do elétron em repouso

R_y - Constante de Rydberg

core - Núcleo do nanofio

l - Número quântico associado ao momento angular

n - Número quântico associado ao nível de energia

shell - Capa do nanofio

AB - Aharonov-Bohm

CI - Circuito Integrado

CVD - Chemical vapor deposition

Eg - Gap

Egc - Gap do material do *core*

Egs - Gap do material do *shell*

hh - Buraco Pesado

K - Temperatura em Kelvin

lh - Buraco Leve

LCG - Laser assisted catalytic growth

MBE - Molecular Beam Epitaxy

Capítulo 1

Introdução

1.1 Breve Histórico

Em 1947 foi criado o primeiro transistor com base em materiais semicondutores da história. Este dispositivo foi fabricado por Bardeen, Shockley e Brattain e ficou conhecido como transistor de ponto. Também nesta época foi criado o primeiro circuito integrado (CI) feito por Jack S. Kilby [1]. Na Figura 1.1 a esquerda, os pesquisadores que desenvolveram o primeiro transistor (no centro) e a direita o primeiro CI. Por meio dos avanços tecnológicos obtidos, tem-se hoje dispositivos eletrônicos extremamente eficazes. Caracterizações físicas mostram que estes sistemas em escala nanométrica apresentam propriedades ópticas e de transporte de grande importância para aplicação promovendo um grande crescimento na fabricação de dispositivos eletrônicos.

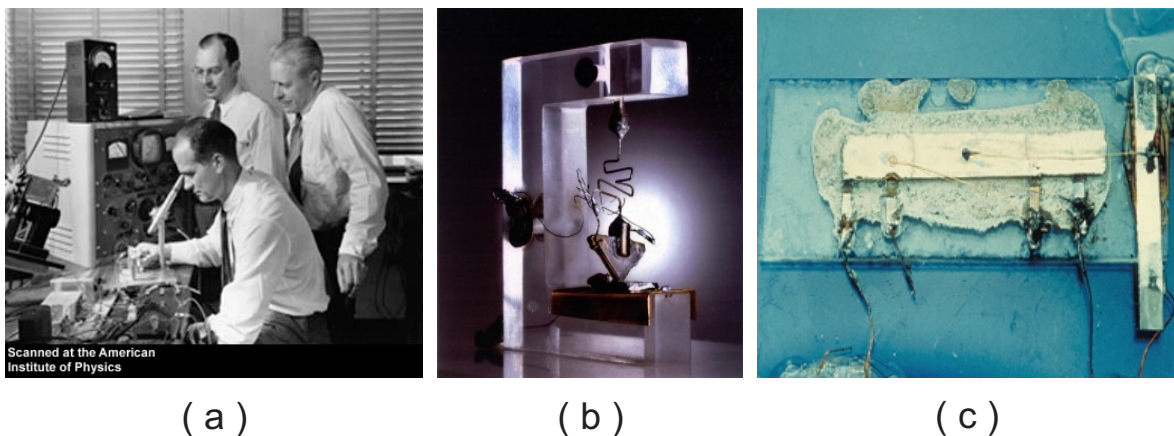


Figura 1.1: (a) Os cientistas John Bardeen (em pé a esquerda), Walter Houser Brattain (em pé a direita) e William Bradford Shockley (sentado) em um laboratório - (b)- Primeiro Transistor produzido com base em semicondutores na história da tecnologia fabricado por Bardeen, Brattain e Houser e (c) Primeiro Circuito Integrado produzido e desenvolvido por Jack S. Kilby, ambos em meados do século passado. [1].

Gordon Moore, um dos fundadores e atual diretor emérito da Intel, fez uma previsão em 1965 que a cada dois anos, o aumento da capacidade de processamento dos computadores dobraria, isso o levou a prever que esta tendência deveria continuar ao longo dos anos. Este fato foi denotado com a lei de Moore. Hoje observar-se que estes valores estão dobrando, em média, a cada dezoito meses [2]. A Figura 1.2 ilustra a previsão feita por Moore (linha azul) e o que vem acontecendo ao longo dos anos com os processadores (linhas verde e vermelha).

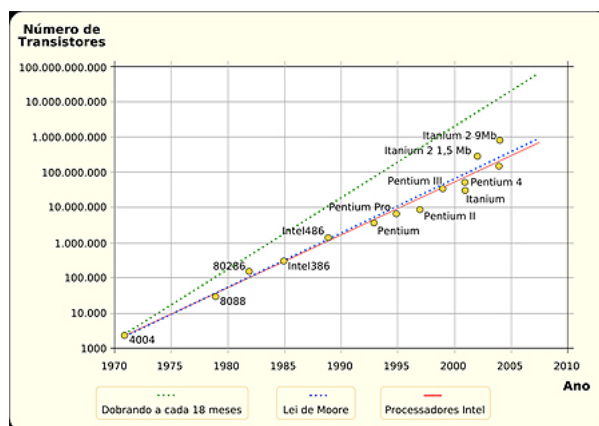


Figura 1.2: Representação gráfica da lei de Moore. A duplicação do poder de processamento em um circuito integrado ocorre a cada dois anos. [3].

No final da década de 60, os pesquisadores Tsu e Esaki [4, 5] propuseram um trabalho teórico inovador no estudo de sistemas heteroestruturados e materiais compostos por diferentes semicondutores. Este trabalho possibilitou abertura de inúmeras pesquisas que até nos dias de hoje trazem grandes avanços. Técnicas como MBE [6] (*Molecular Beam Epitaxy*), MOCVD [7] (*Metalorganic chemical vapor deposition*), CVD [8] (*Chemical vapor deposition*) além de VLS [9] (*Vapor-liquid-solid*) constituem a vanguarda de crescimento de materiais semicondutores.

Uma pesquisa realizada no site de busca de *papers*, *Science Direct*, nos revela que pelos últimos 40 anos, publicou-se em revistas e periódicos mais de 310.000 trabalhos baseados em materiais semicondutores. Dentre estes, mais de 30.000 publicações descrevem alguma propriedade de fios quânticos.

A Figura 1.3 ilustra duas aplicações de dispositivos eletrônicos utilizando semicondutores, à esquerda, laser para transmissão de dados através de propriedades ópticas e à direita um processador da Intel *hexa-core*.

Os trabalhos experimentais têm mostrado o crescimento de heteroestruturas longitudinais, investigando propriedades ópticas destes materiais [11, 12, 13, 14]. Trabalhos teóricos tem por interesse a investigação de propriedades eletrônicas dos portadores, ópticas e estados de impurezas. Os métodos mais empregados na literatura baseiam-se em: cálculo *ab initio*, *tight binding* (ligação forte), $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e aproximação da massa efetiva com base na função envelope [15, 16, 17].

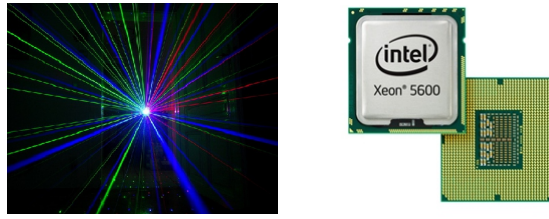


Figura 1.3: Importantes aplicações tecnológicas de semicondutores. Esquerda, fonte de laser multicore e direita, processador intel xeon com seis núcleos físicos. Crédito de [10]

1.2 Bandas de Energia

Para a compreensão dos mecanismos responsáveis pela corrente elétrica em materiais semicondutores, e suas aplicações na nanotecnologia, é necessário um estudo das estruturas de bandas destes materiais. Elétrons em um átomo isolado tem estados quânticos estacionários caracterizados por níveis de energia quantizados e discretos, que por sua vez corresponde aos orbitais atômicos $1s$, $2s$, $2p$, $3p$, $3d$,..., de modo a satisfazer o princípio de exclusão de Pauli. Em um átomo isolado o cálculo é baseado na equação de Schrödinger, e a solução é exata para elementos de baixo número atômico. Em um sólido, onde existe um grande número de átomos próximos, o cálculo exato se torna muito complicado, pois há interação dos elétrons de cada átomo com os elétrons dos átomos vizinhos e interação dos elétrons com os núcleos dos átomos vizinhos, além de interações entre núcleos e núcleos. Um elétron que está no nível $1s$ de um desses átomos também pode ocupar este mesmo nível em outro átomo, ele irá ter duas funções de ondas distintas que descreverão estes dois estados possíveis, porém compartilhando a mesma energia, ou seja, terão uma dupla degenerescência. A degenerescência é "quebrada" quando são aproximados vários átomos, assim formando uma banda de energia quase contínua.

Por haver uma grande quantidade de átomos ($N \sim 10^{23} \text{cm}^{-3}$) dispostos periodicamente na estrutura cristalina, os estados energéticos se distribuem por meio de faixas contínuas de energia, que se separam uma das outras por faixas de energias proibidas. Os estados de energia permitidos, são definidos como **bandas de energia**, os estados de energia proibidos, é o **gap**, conforme mostra a Figura (1.4).

Semicondutores à temperatura de 0 K , se comportam como isolantes, tendo todos os estados de energia permitidos abaixo do nível de Fermi ocupados e todos os estados de energia permitidos acima do nível de Fermi desocupados. Os estados de energias menores que a energia de Fermi são localizados em bandas denominadas **banda de valência**. Enquanto os estados com energia maior que a energia de Fermi são localizados em bandas definidas como **banda de condução**. O gap do semicondutor é a energia correspondente à diferença entre a energia do topo da banda de valência, e o mínimo da banda de condução, e a energia de Fermi em um semicondutor intrínseco ¹ é a energia do centro do gap [18].

¹Semicondutor intrínseco é um semicondutor puro, livre de dopagem.

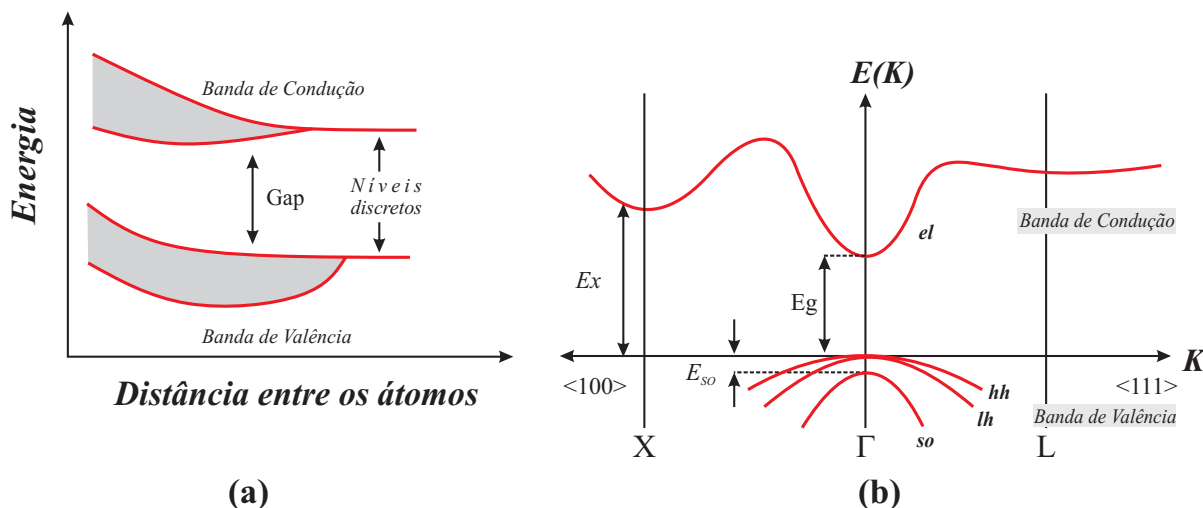


Figura 1.4: (a) Formação das bandas de energia devido à aproximação de um grande número de átomos em um sólido semiconductor (b) Bandas de energia em um semiconductor. As regiões hachuradas ilustram a ocupação dos elétrons com $T > 0K$.

A Figura 1.4 (a) ilustra os estados de energia permitidos para o preenchimento das bandas em um semiconductor quando aproximado um grande número de íons. A Figura 1.4 (b) representa a ocupação das bandas de energia com a temperatura $T > 0K$, da energia versus o vetor de onda k .

1.3 Aproximação Adiabática

Para compreendermos as propriedades eletrônicas de materiais semicondutores é necessário examinar o comportamento dos elétrons que estão em seu interior, quando submetidos a campos externos. Para descrevermos um sistema de muitos corpos, inicialmente iremos negligenciar a interação *spin-órbita* e outras contribuições relativísticas [18, 19].

Um cristal ideal consiste de um conjunto infinito de íons localizados próximos dos sítios da rede e um gás de elétrons que se movem no campo dos íons. As propriedades básicas do cristal dependem da dinâmica destes sistemas interagentes e a resolução deste problema depende da solução da equação de Schrödinger, a qual inclui as interações elétron - elétron, elétron - íon e íon - íon. Então introduzimos interações que nos permitem encontrar soluções correspondentes a diferentes aspectos do comportamento do cristal: movimento eletrônico, movimento iônico e suas interações com várias perturbações incluindo campos externos.

A equação de Schrödinger completa, para n elétrons e N íons, escrita em termos das coordenadas eletrônicas, $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$ e das coordenadas iônicas $R_1, R_2, R_3, \dots, R_N$ é:

$$\left[-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 - \sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_k} \nabla_k^2 + \sum_{i < j=1}^n \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{I < J}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} \right]$$

$$\left[-\sum_{i,I}^{n,N} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, R_1, \dots, R_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, R_1, \dots, R_N), \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética de elétrons, o segundo a energia cinética de íons, o terceiro a energia potencial de interação Coulombiana entre elétron - elétron, o quarto termo representa a energia potencial de interação Coulombiana íon - íon e o quinto termo a energia potencial de interação Coulombiana entre elétron e íon. $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|$, $|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|$ são respectivamente, as distâncias entre o elétron i e o elétron j ; o íon I e o íon J e entre íon I e o elétron i . Nesta equação, a interação *spin-órbita* é omitida.

Como a massa do elétron é menor que a massa do íon por um fator de aproximadamente 1/1800 ($m_i \approx 1.8 \times 10^{-3} M_I$) a energia cinética do elétron é muito maior que a dos íons. A distribuição eletrônica ajusta-se continuamente com as posições dos íons, que em qualquer instante pode ser considerado a mesma, como se os íons estivessem em repouso. Esta hipótese é chamada de aproximação adiabática (Born e Oppenheimer 1927) [20]. Pode ser expressa escrevendo a função de onda $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, R_1, \dots, R_N)$ como um produto de funções de coordenadas eletrônicas ($\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, R_1, \dots, R_N$), representada coletivamente por r e as coordenadas iônicas representada coletivamente por R :

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \varphi(\mathbf{R}) \quad (1.2)$$

onde $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ é a autofunção eletrônica, que dependem da coordenada \mathbf{r} dos elétrons e a coordenada \mathbf{R} dos íons, aparecendo como um parâmetro fixo. Esta autofunção satisfaz a equação de Schrödinger eletrônica:

$$\left[-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 - \sum_{i<j=1}^n \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,I}^{n,N} \frac{Z_I}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}_i|} \right] \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_e(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (1.3)$$

onde $E_e(\mathbf{R})$ é a energia dos elétrons, ou seja, auto-valores eletrônicos, que depende da coordenada \mathbf{R} . A função $\varphi(\mathbf{R})$ é a autofunção iônica e satisfaz a equação:

$$\left[-\sum_{I=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \Phi(\mathbf{R}) \right] \varphi(\mathbf{R}) = E \varphi(\mathbf{R}) \quad (1.4)$$

onde:

$$\Phi(\mathbf{R}) = E_e + \sum_{I<J}^N \frac{Z_I Z_J}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} \quad (1.5)$$

é a energia potencial efetiva dos íons e E é a energia total. A eq. (1.4) é a equação de Schrödinger iônica e surge da substituição da eq. (1.2) na eq. (1.1).

As coordenadas iônicas \mathbf{R} na eq. (1.4) são arbitrárias. Se os íons ocupam a posição R_0 de equilíbrio da estrutura cristalina, o potencial de interação elétron-ion torna-se um potencial

periódico, com a periodicidade da rede cristalina. O número de termos que contém a eq. (1.4) é muito menor que o número de termos que aparecem na eq. (1.1), entretanto, mesmo com a aproximação adiabática, a solução exata da eq. (1.4) não é possível, tendo em vista o grande número de termos restantes. Consideramos então que os elétrons sejam partículas indistinguíveis e independentes (aproximação do elétron independente), e que cada elétron se move sob influência de um potencial médio $V_{cr}(\mathbf{r})$, o qual descreve as interações elétron-íon. Assim, o movimento de um único elétron pode ser descrito por meio da equação de Schrödinger:

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V_{cr}(\mathbf{r}) \right) \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = E_{n,k} \psi_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

Em uma estrutura cristalina ideal, o potencial $V_{cr}(\mathbf{r})$ é periódico, e a função de onda descreve um estado de Bloch:

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

onde $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ é uma função de onda plana, e $u_{n,k}(\mathbf{r})$ é uma função de Bloch, que tem periodicidade da rede cristalina ($u_{n,k}(\mathbf{r}) = u_{n,k}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$) e descreve o comportamento da função de onda dentro de uma cela unitária. Substituindo a eq. (1.7) na eq. (1.6), temos que:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V_{cr}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right) u_{n,k}(\mathbf{r}) = E_{n,k} u_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

onde indentificamos o operador Hamiltoniano como:

$$\mathcal{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V_{cr}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right), \quad (1.9)$$

Se tomarmos o centro da zona de Brillouin, ponto Γ ($k = 0$), a solução para a eq. (1.8) forma um conjunto completo de função $u_{n,0}(\mathbf{r})$ (para $n=1,2,3,\dots$), o que nos permite calcular a função de onda para qualquer $\mathbf{k} \neq 0$ como uma combinação linear das funções de Bloch.

$$u_{n,k}(\mathbf{r}) = \sum_{n'}^{\infty} c_{n,n'} u_{n',0}(\mathbf{r}), \quad (1.10)$$

onde o coeficiente $c_{n,n'}$, é conhecido como função envelope [21].

Como o interesse é focado no estudo de elétrons que estão localizados na banda de condução, a qual é bastante afastada da banda de valência, (exceto para semicondutores de gap estreito) podemos adotar simplificações e estudar o modelo de uma banda. Assim, a função de onda para um estado excitado de um elétron na banda de condução é formado por uma função de Bloch e a função envelope correspondente, ou seja, o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é expandido em um elemento de base dado pela eq. (1.10)

$$\langle u_{n,0} | \mathcal{H}_{kp} | u_{n,0} \rangle = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (1.11)$$

Este modelo leva a uma dispersão de energia de forma equivalente ao que ocorre no modelo de elétrons livres. Entretanto, a região da banda de condução próximo ao ponto $k = 0$ tem forma aproximadamente parabólica e a curvatura desta parábola difere do modelo de elétrons livres e depende da composição específica do semicondutor e de sua estrutura. Baseado na aproximação da massa efetiva, esta curvatura é introduzida por meio de um parâmetro empírico chamado massa efetiva (m_e^*). A massa efetiva pode ser calculada por meio da teoria da perturbação aplicando ao Hamiltoniano \mathbf{k}, \mathbf{p} . Neste sentido, o Hamiltoniano não perturbado e a perturbação são definidos, respectivamente, como:

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_{cr}(\mathbf{r}), \quad (1.12)$$

e

$$\mathcal{H}' = \frac{\hbar^2}{2m_0}|\mathbf{k}^2| + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}, \quad (1.13)$$

a energia $E_{n,k}$ de segunda ordem perturbativa é dada por:

$$E_{n,k} = E_{n,0} + \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|P_{n,n'}^\alpha|^2}{E_{n,0} - E_{n',0}} \right], \quad (1.14)$$

onde o termo $P_{n,n'}^\alpha$ é um parâmetro empírico determinado experimentalmente, e o termo entre chaves, identificamos como o inverso da massa efetiva:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|P_{n,n'}^\alpha|^2}{E_{n,0} - E_{n',0}} \quad (1.15)$$

Assim, podemos descrever a dependência que a energia tem da massa efetiva pela equação:

$$E(k) = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (1.16)$$

de modo que o Hamiltoniano associado a energia descrita na eq. (1.16) é dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m^*}, \quad (1.17)$$

Portanto, no caso de um cristal periódico infinito, onde tem-se mobilidade eletrônica em todas as direções (Bulk), a função envelope a banda de condução é uma onda plana, de acordo com o teorema de Bloch, eq. (1.7). Do ponto de vista da cinemática de um elétron de Bloch, a aceleração, é dada por:

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} = \frac{\partial \mathbf{v}_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} [\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})]$$

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial t} \quad (1.18)$$

onde usamos a relação $v_k = \nabla_k \omega_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\mathbf{k})$, ou seja, a velocidade do elétron no estado \mathbf{k} é igual ao gradiente no espaço recíproco da banda de energia. A aceleração pode ser escrita como:

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{dk}{dt} \quad (1.19)$$

Assim:

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} \cdot \mathbf{F} \quad (1.20)$$

onde usamos o fato que $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = \hbar d\mathbf{k}/dt$. Comparando esta última equação com o princípio fundamental da dinâmica, temos que:

$$\mathbf{F} = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right]^{-1} \mathbf{a} \quad (1.21)$$

de modo que a massa pode ser expressa como:

$$m_{i,j}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right]^{-1} \quad (1.22)$$

a eq. 1.22 representa o tensor massa efetiva de um elétron de banda, cujas componentes são:

$$\frac{1}{m_{i,j}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad (1.23)$$

Assim, um elétron de Bloch excitado por um campo de forças externas comporta-se como se possuísse uma massa anisotrópica, diferente da massa eletrônica de repouso m_e . Isto ocorre porque a massa efetiva incorpora implicitamente os efeitos das forças internas da banda de energia $E(\mathbf{k})$. Para alguns cristais complexos as componentes não diagonais do tensor massa efetiva são diferentes de zero. Assim, um campo elétrico aplicado em uma certa direção do cristal pode causar aceleração eletrônica em uma direção diferente. Na maior parte dos semicondutores o tensor massa efetiva é diagonal e em especial, nos cristais isotrópicos, o tensor se reduz a um escalar:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\partial^2 E(\mathbf{k}) / \partial k^2 \right)} \quad (1.24)$$

Os valores teóricos encontrados para a massa efetiva ², valem tanto para elétrons quanto para buracos, e de modo geral, estes valores são alterados conforme a estrutura cristalina, periodicidade

²Os valores das massas efetivas utilizadas neste trabalho foram retiradas da literatura descritos na Tabela 3.1.

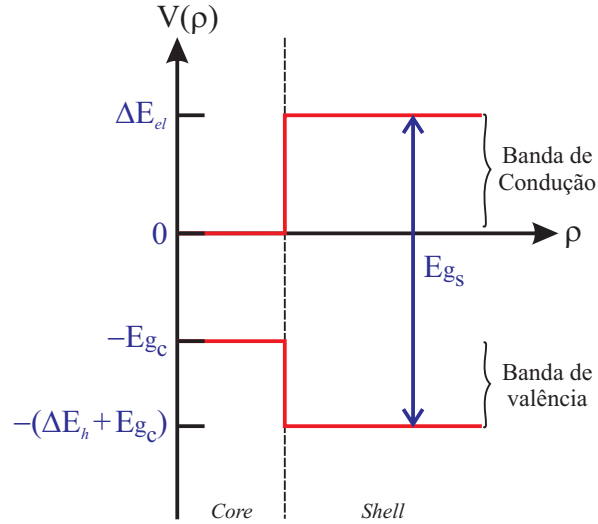


Figura 1.5: Representação esquemática do potencial de uma heterojunção ao longo da direção ρ , onde E_{gc} é o *gap* na região do *core* e E_{gs} é o *gap* na região da *shell*, ΔE_{el} é o potencial que confina elétrons e ΔE_h é o potencial que confina buracos.

da rede e a composição química do material. Em linhas gerais os elétrons na banda de condução de um material são considerados partículas que se movem livre, onde a influência do potencial eletrostático e as interações com os outros elétrons na introdução da massa efetiva são levados em conta [22]³.

1.4 Aproximação da Função Envelope

A aproximação da função envelope é um formalismo matemático que nos permite utilizar a aproximação da massa efetiva para estudar materiais heteroestruturados, por meio do Hamiltoniano [23]:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}), \quad (1.25)$$

O método considera que todos os materiais que constituem a heteroestrutura, apresentam o mesmo tipo de estrutura cristalina e constantes de rede similares, de forma que podemos atribuir a mesma função de Bloch para todo sistema.

Esta Aproximação se torna necessária, pois empregamos a aproximação da massa efetiva onde foi considerado um cristal de tamanho infinito. Para efeito de cálculo, consideraremos agora heteroestruturas limitadas a tamanhos nanoscópicos, pois, quando levamos em consideração que o sistema é limitado pelo tamanho do cristal, o elétron também é confinado nos

³Para uma diferente abordagem à massa efetiva, o leitor pode recorrer as Referências [24, 25, 26, 27, 28].

limites desta heteroestrutura. Esta é a razão que torna o espectro de energia quantizado em níveis discretos na parte inferior da banda de condução.

O confinamento espacial, é definido pelo potencial $V(\mathbf{r})$, que por sua vez é definido pelo não alinhamento das bandas de energia dos materiais que formam a heteroestrutura, conforme ilustra a Figura 1.5, para o caso de fios *Core-Shell*, que iremos abordar neste trabalho.

Uma grande vantagem de se utilizar as aproximações da massa efetiva e da função envelope, é a simplicidade para incluir efeitos de confinamento adicionais, tais como, campos elétricos ou magnéticos, na descrição teórica do movimento de elétrons e buracos. Esta tarefa é muitas vezes reduzida a introdução de um termo de potencial no Hamiltoniano da eq. 1.25. Além disso, este formalismo facilita a solução da equação de Schrödinger por meio de técnicas numéricas de discretização por diferenças finitas [20, 21, 22].

1.5 Fios Quânticos

Nos últimos anos, pesquisas científicas tem dado grande atenção no estudo de propriedades eletrônicas e ópticas de nanofios semicondutores. Como dispositivos eletrônicos, fios quânticos são ideais para circuitos ópticos integrados, devido sua alta eficiência e o baixo consumo de energia.

Em particular, as aplicações destas estruturas de baixa dimensionalidade em dispositivos fotônicos e opto-eletrônicos são de grande interesse para indústria eletrônica, e muito têm se dedicado à sua fabricação, utilizando técnicas de crescimento epitaxial, tais como deposição por epitaxia de vapor de metal orgânico (MOVPE: Metalorganic Vapour Phase Epitaxy) [29], Epitaxia de feixe químico (CBE: Chemical Beam Epitaxy) [30] e epitaxia de feixe molecular (MBE: Molecular Beam Epitaxy) [31, 32, 33], além de métodos baseados em Vapor-Líquido-Sólido (VLP: Vapor-Liquid-Phase) [34] e deposição por vapor químico (CVD: Chemical Vapor Deposition) [35].

Com intuito de aplicação em memórias não-voláteis, Zhu e colaboradores [11] mostraram recentemente que de nanofios de silício (Si) envolvido por um dielétrico de alta constante dielétrica (*high-k dielectric*), como mostrado na Figura 1.7, exibem excelente operações de gravação e limpeza além de um longo tempo de retenção e boa resistência. Isto mostra que materiais com alta constante dielétrica, crescido ao redor de estruturas de baixa dimensionalidade continua a atrair a atenção de pesquisadores afim de se estender a lei de Moore [2].

Por outro lado, nanofios de diâmetros com ordem de grandeza de alguns nanômetros, e que podemos considerar como sendo estruturas de quase 1-D, têm sido fabricados [41, 42], e estudos de efeitos de confinamento de portadores (elétrons e buracos) têm sido demonstrados com diferentes níveis de sofisticação [13, 16, 36, 37]. Silva e colaboradores [13] apresentaram um estudo das propriedades de excitons em nanofios $Si_{1-x}Ge_x$ cilíndricos, envolvidos por uma matriz de silício, para as duas formas conhecidas de alinhamentos de bandas: tipo I e tipo II. O método usado pelos autores é baseado na aproximação da massa efetiva e função envelope. Em geral, estudos teóricos tem por base: (i) o uso da aproximação da massa efetiva, para cálculos de níveis de energia dos portadores e da energia de ligação de excitons; (ii) solução auto-consistente

das equações de Schrödinger e Poisson em coordenadas cilíndricas, que fornecem descrições práticas das propriedades eletrônicas e ópticas de fios quânticos dopados [13]; (iii) métodos baseados em cálculos de primeiros princípios (métodos *ab initio*) [38], que por apresentarem altos custos computacionais, possuem limitações para estudos de nanofios com diâmetros entre 1 e 2 nm. Contudo, cálculos *ab initio* podem apresentar importantes informações a respeito de alinhamentos das bandas e propriedades de dopantes [39, 40]. Outros métodos são ligação forte (tight binding) e $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

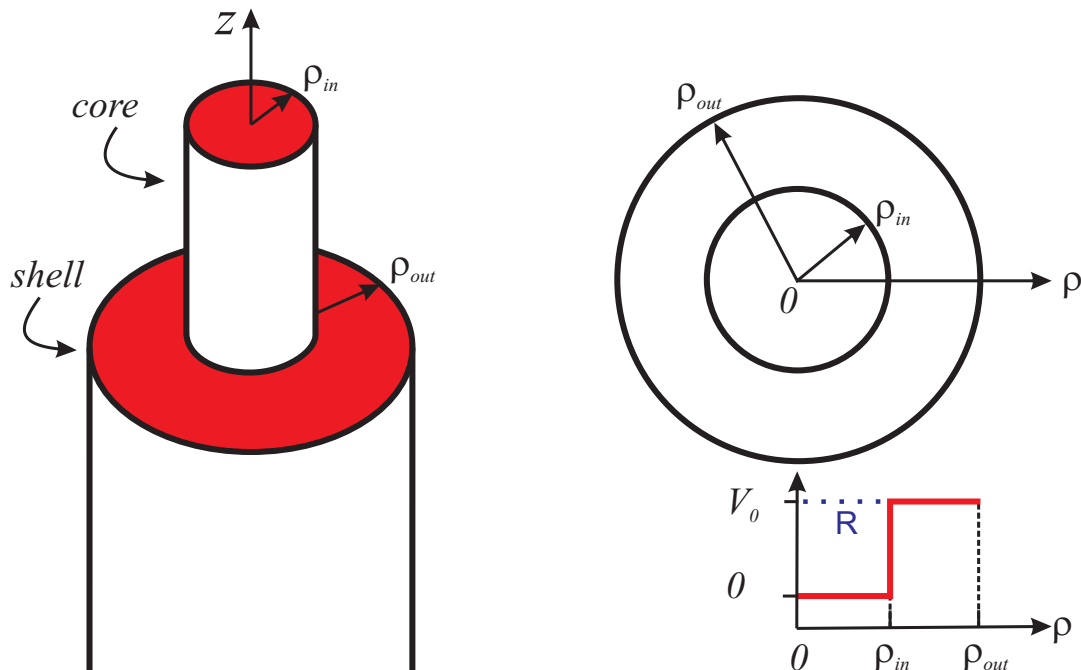


Figura 1.6: A esquerda - Fio quântico *Core-Shell* e a direita - Corte em perspectiva de um nanofio no plano de confinamento, abaixo perfil do potencial ao longo de ρ .

As Figuras 1.7 e 1.8 são retiradas de trabalhos experimentais que pesquisaram fios quânticos nanoestruturados, onde os principais focos são propriedades ópticas e eletrônicas para os materiais InP e GaN. foram utilizadas técnicas de crescimento Epitaxia Metalorgânico fase de vapor (MOVPE) e Vapor-sólido-líquido (VLS), em nanofios com diâmetro, respectivamente, entre 10 e 20 nm.

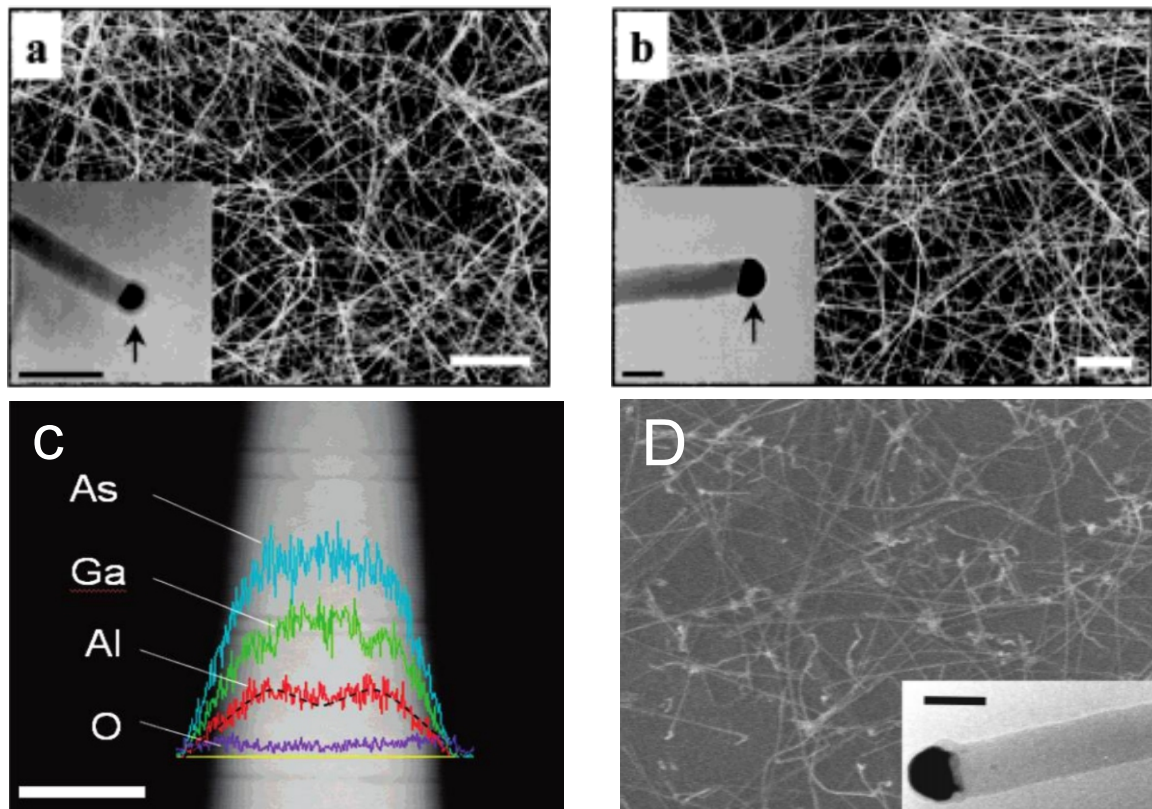


Figura 1.7: Fios Quânticos (a) Imagem SEM para o material GaAs com o raio do fio igual à 50 nm crescidos com técnicas LCG, [41](b) Imagem SEM para o material GaP com o raio do fio igual à 50 nm crescidos com técnicas LCG, [41] (c) Imagem TSEM para o nanofio AlGaAs, crescimento perpendicular de Al (Alumínio), Ga (Gálio), As (Arsênio) e O (Oxigênio), respectivamente, barra de referência igual a 50 nm crescido com técnicas MBE, [42] e (d) Imagem de AFM de um nanofio de Si sobre o substrato de Au (Ouro) com raio de 10 nm crescidos com técnicas VLS, [35]

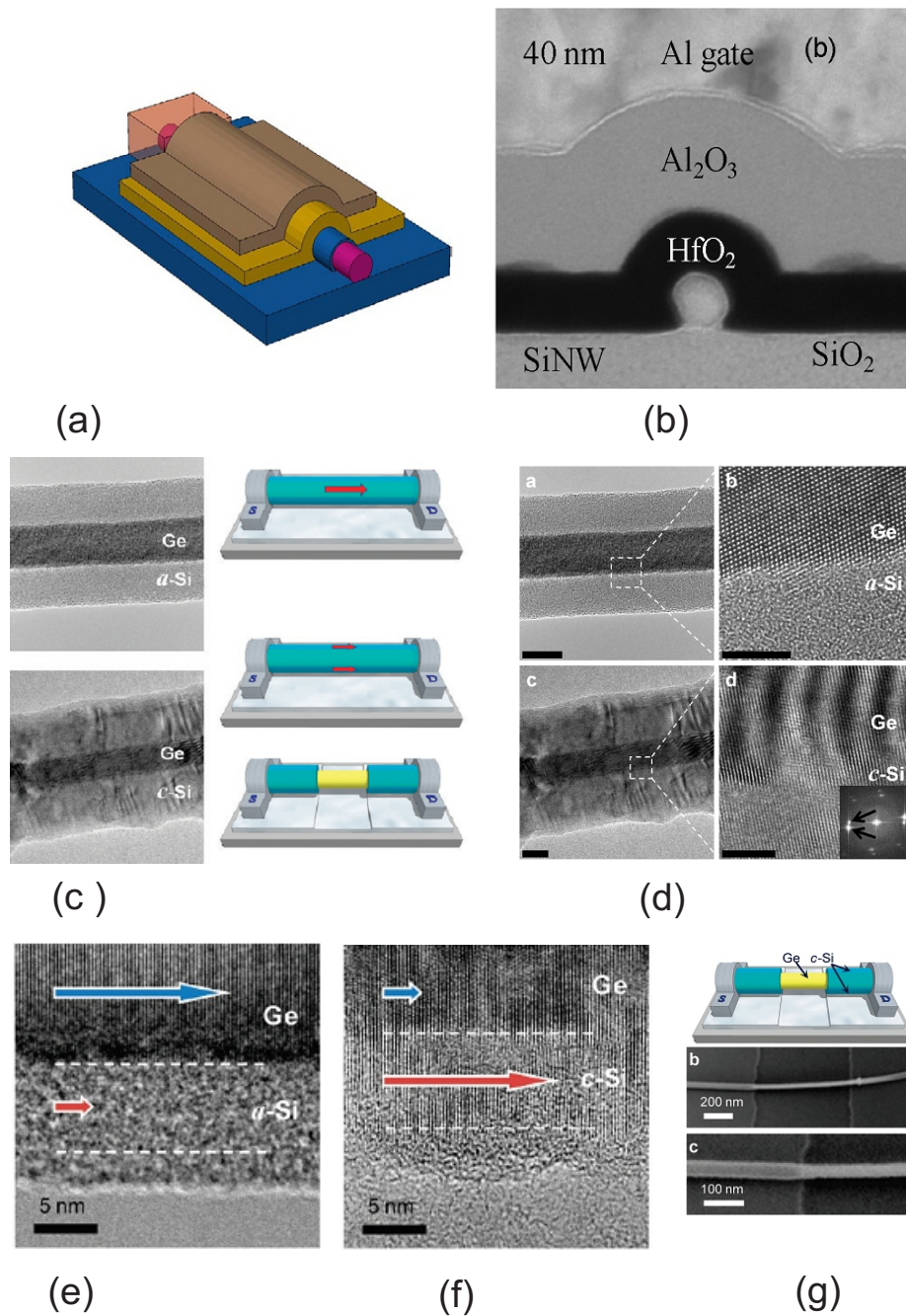


Figura 1.8: (a) Esquema de montagem de um nanofio em 3D (corte ao longo da direção da largura do canal do fio quântico) nanofio de Si coberto com uma camada de óxido, funcionando com armadilha para o elétron, (b) Microscopia eletrônica de transmissão da seção transversal em nanofio de Si, (c) Fio quântico *Core-Shell* de Ge/Si, respectivamente, com efeito de dopagem (d) Imagem de TEM de um fio *Core-Shell* de Ge/a-Si (Germânio com silício amorfo) na parte superior, e Ge/c-Si (Germânio com carbeto de silício) na parte inferior, (e) Imagem HRTEM de Ge/a-Si para um semiconductor do tipo-n (f) Imagem HRTEM de Ge/c-Si para um semiconductor do tipo-n e (g) Esquema de montagem de um nanofio tipo-n de Ge/c-Si. [11, 12].

1.6 Potencial de Confinamento

O potencial de confinamento de portadores surge devido ao não alinhamento das bandas de energia nestes que formam a heteroestrutura. Como as bandas de energia nestes materiais estão separadas por diferentes gaps, o desalinhamento das bandas atraem portadores para a região onde o potencial é menor. A fração Q_e , que define o quanto da diferença entre os gaps confina elétrons, é chamado de *band-off-set* de condução, enquanto a fração Q_h é chamado de *band-off-set* de valência, e define o quanto da diferença entre os gaps confina buracos. O *band-off-set* é um parâmetro obtido de resultados experimentais e pode ser calculado também por meio da afinidade eletrônica em referência ao nível de vácuo.

O confinamento dos portadores pode ocorrer em uma, duas ou três dimensões, conforme mostrado na Tabela 1.1. Em uma dimensão, o sistema tem dois graus de liberdade (2-D) como ocorre em poços quânticos, e a ideia de 2-D se dá pela quantidade de dimensões livres para mobilidade dos portadores. Quando temos confinamento em duas dimensões, temos mobilidade eletrônica em 1-D, tais como ocorre em fios quânticos ou nanofios e, por fim, quando temos confinamento em todas as direções, os portadores tem zero grau de liberdade, 0-D, assim como ocorre em pontos quânticos, os quais as vezes são chamados de átomos artificiais, pelo fato das energias dos elétrons serem quantizadas e a carga total ser restrita a um pequeno número de elétrons, da mesma forma que ocorre em átomos [43].

Tabela 1.1: - Número de grau de confinamento e o graus de liberdade para diferentes heteroestruturas [28]

Sistema	G_{conf}	G_{liber}
Bulk	0	3
Poço Quântico	1	2
Fio Quântico	2	1
Ponto Quântico	3	0

Podemos observar na Tabela acima que a regra matemática $G_{conf} + G_{liber} = 3$ é mantida, estando de acordo com o confinamento para cada tipo de heteroestrutura.

Como visto na Figura 1.5, pode-se observar a seguinte igualdade:

$$E_{gs} - E_{gc} = \Delta E_{el} + \Delta E_h, \quad (1.26)$$

onde E_{gs} é o gap na região do *shell*, E_{gc} é o gap na região do *core*, ΔE_{el} é o potencial que confina elétrons e ΔE_h é o potencial que confina buracos.

O potencial que confina elétrons (ΔE_{el}) e buracos (ΔE_h) pode ser obtido por meio da razão:

$$\frac{\Delta E_{el} + \Delta E_h}{\Delta E_{el} + \Delta E_h} = \frac{\Delta E_{el}}{\Delta E_{el} + \Delta E_h} + \frac{\Delta E_h}{\Delta E_{el} + \Delta E_h} = 1, \quad (1.27)$$

onde definimos:

$$Q_c = \frac{\Delta E_{el}}{\Delta E_{el} + \Delta E_h}, \quad (1.28)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_h}{\Delta E_{el} + \Delta E_h}, \quad (1.29)$$

O *band-off-set* em função das energias de *gap* dos materiais pode ser expresso:

$$Q_c = \frac{\Delta E_{el}}{E_{gs} - E_{gc}}, \quad (1.30)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_h}{E_{gs} - E_{gc}}, \quad (1.31)$$

Assim os potenciais de confinamento podem ser calculados em função do *band-off-set* e dos *gap's* [43, 44, 45]:

$$\Delta E_{el} = Q_c(E_{gs} - E_{gc}), \quad (1.32)$$

$$\Delta E_h = Q_v(E_{gs} - E_{gc}). \quad (1.33)$$

1.7 Excitons

Em temperatura ambiente, um semiconductor possui banda de valência parcialmente preenchida e banda de condução parcialmente vazia, conforme ilustrado na Figura 1.4 (b). A excitação térmica que promove um elétron para a banda de condução deixa no topo da banda de valência uma vacância, que se comporta como uma partícula carregada positivamente, denominada lacuna, ou buraco. Entretanto na banda de condução o elétron não está completamente livre para produzir uma corrente eletrônica, e sim ligado ao buraco da banda de valência por meio de interação Coulombiana. O par de partículas elétron-buraco recebe o nome de exciton, e uma das condições a ser satisfeita para a existência do exciton é que a velocidade de grupo dos portadores devem ser iguais [46].

Na literatura encontramos dois tipos de exciton, o exciton de Frenkel [47, 48] e o exciton de Wannier - Mott [49, 50]. A interação elétron-buraco do exciton de Frenkel é conhecida como interação forte, pelo fato do elétron orbitar a carga positiva (buraco), semelhante ao átomo de hidrogênio. O exciton de Wannier - Mott é de ligação fraca ⁴, e é mais comum em semicondutores. A Figura 1.9 ilustra um modelo esquemático de um exciton de Frankel e um exciton de Wannier - Mott.

Em um material *bulk* a energia total de exciton é dada simplesmente pela diferença entre a energia do gap e a energia de ligação, isso porque o elétron em um *bulk* ocupa o topo da banda

⁴Neste trabalho é utilizado o exciton de Wannier-Mott.

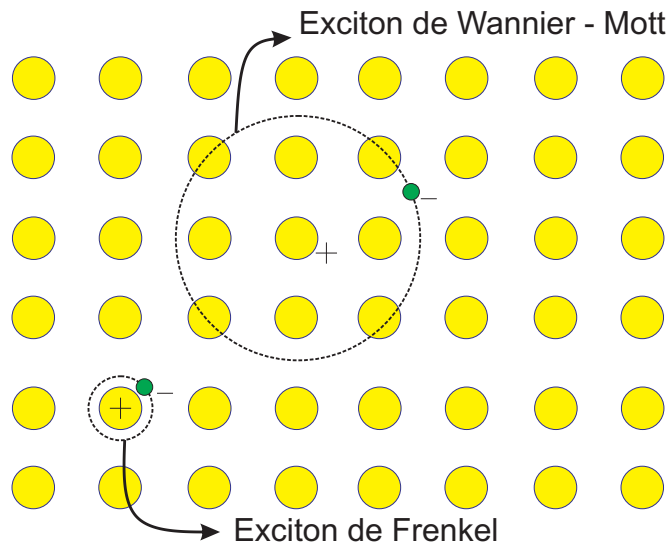


Figura 1.9: - Representação do exciton de Wannier - Mott, e exciton de Frenkel.

de valência e passa a ocupar o mínimo da banda de condução, ao contrário de heteroestruturas confinadas onde os portadores não ocupam a região de máximo e de mínimo das bandas de valência e condução, respectivamente. Assim, a energia total de exciton em um *bulk* é dada por:

$$E_{exc} = E_g - |E_b| \quad (1.34)$$

já para materiais heretoestruturados é dada:

$$E_{exc} = E_R - |E_b| \quad (1.35)$$

onde E_R é conhecido como energia de recombinação e é descrito pela equação:

$$E_R = E_g + E_{el} + E_h \quad (1.36)$$

Podemos observar que a energia total de exciton depende diretamente do tipo de heteroestrutura que o semiconductor é crescido. Isso ocorre pelo fato da energia depender do grau de confinamento dos portadores e de sua mobilidade. Analogamente ocorre com a energia de ligação, que também depende do tipo de estrutura confinante e de seus graus de liberdade [24].

1.8 Efeito Aharonov-Bohm

Abordaremos em nosso trabalho o problema de um elétron em um fio quântico sob influência de um campo magnético externo, por isso se faz necessário fazer uma breve abordagem sobre

o efeito Aharonov-Bohm, que vem sendo discutido amplamente nos últimos anos para sistemas com simetria cilíndricas [51, 52, 53].

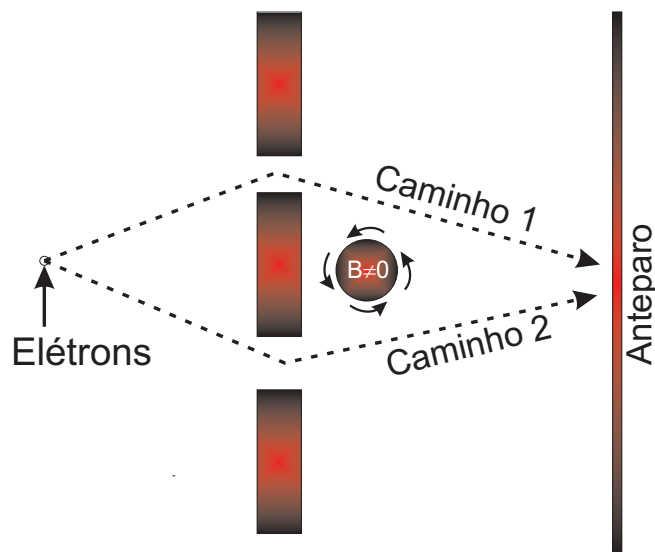


Figura 1.10: Ilustração da experiência proposta por Aharonov-Bohm. Entre duas fendas é aplicado um campo magnético \mathbf{B} , sendo diferente de zero somente na região interna ao campo aplicado, porém o potencial vetor (indicado pelas linhas sólidas) é diferente de zero em todo o espaço, com simetria cilíndrica, causando efeitos opostos no caminho 1 e 2.

A Figura 1.10 ilustra um esquema de montagem da experiência de Aharonov-Bohm com dupla fenda, os feixes de elétrons podem tomar dois caminhos possíveis para atingir o anteparo gerando um padrão de interferência. Entre as duas fendas é colocado um material (ímã permanente ou um solenóide) cilíndrico que gera um campo magnético \mathbf{B} apenas em seu interior. Os possíveis caminhos dos elétrons estão na região onde o campo é nulo.

Mesmo sem a presença do campo magnético no caminho onde os elétrons passam, existe um potencial vetor \mathbf{A} nesta região, dado por: $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$, fazendo com que o momento do elétron neste sistema assumo que $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$. Tomando o campo magnético do material como $\mathbf{B} = B\hat{k}$, o potencial vetor pode ser expresso por um *gauge* simétrico expresso por $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\theta$. Observando a Figura 1.10, o potencial vetor aponta para o mesmo sentido que o caminho 2, e no sentido oposto ao caminho 1, isso implica que os elétrons que passam pelo caminho 1 terão o seu momento \mathbf{p} diferente dos elétrons que passam pelo caminho 2, este fato altera o padrão de interferência gerado no anteparo. Esta diferença observada no anteparo devido a aplicação do campo magnético do material, dá-se o nome de efeito Aharonov-Bohm [56].

Nesta abordagem, escolhemos um potencial vetor com *gauge* específico, contudo, descrições mais amplas que mostram que este efeito não depende da escolha do *gauge* para o potencial vetor podem ser vistos nas referências [25, 54, 55, 56].

Nesta dissertação, estudamos uma oscilação Aharonov-Bohm modificada, onde as oscilações nas autoenergias de um elétron em um nanofio submetido a um campo magnético externo, aplicado na direção perpendicular ao plano do fio quântico. Veremos estes resultados no capítulo

três, que se devem a mudanças de fase na função de onda quando o fluxo magnético ϕ , passa através do nanofio e alcança o fluxo magnético quântico ϕ_0 . Esta alteração no fluxo magnético faz com que o sistema assuma uma periodicidade para este novo fluxo. Esta mudança de fase acarreta uma troca periódica de momento angular quando variado este fluxo magnético [57].

1.9 Escopo e objetivo da Dissertação

Neste trabalho pretende-se estudar materiais nanoestruturados, compostos por vários materiais semicondutores e dielétricos utilizando a metodologia baseada na aproximação da massa efetiva e função envelope. O estudo tem como foco principal heteroestruturas de fios quânticos do tipo *Core-Shell*, como a ilustrada na Figura 1.6, os quais têm recebido destaque especial pelas suas ricas propriedades intrínsecas, bem como pelos seus potenciais para fabricação de novos dispositivos.

A presente dissertação divide-se em cinco capítulos e um apêndice, sendo o primeiro esta introdução, onde foi dissertado um pouco do contexto histórico dos semicondutores, e as aproximações utilizadas, bem como as principais definições de sistemas de baixa dimensionalidade e exciton.

No segundo capítulo, foi descrito o modelo teórico utilizado para os cálculos das energias de ligação, energia de recombinação e energia total de exciton, aplicando campo magnético na direção do eixo z , neste capítulo também foi realizada a discretização da equação de Schrödinger por meio de técnicas de diferença finitas, para obtenção das autofunções do operador Hamiltoniano e suas autoenergias.

No capítulo três, foi exposto os resultados para as energias dos portadores, considerando as contribuições do potencial de auto energia. Este potencial é devido ao *mismatch* das constantes dielétricas, que causam uma polarização no meio dielétrico. Em sistemas onde $\epsilon_r < 1$, o efeito do potencial de auto energia modifica consideravelmente o perfil do potencial, criando cúspides na região de interface, podendo ter confinamento interfacial de alguns portadores. Analizamos as energias dos portadores em regiões negativas, observado apenas quando considerado o potencial de auto energia $\Sigma_i(\rho_i)$ e o espalhamento das funções de ondas. Realizamos os cálculos das projeções do buraco leve sobre o elétron e buraco pesado sobre o elétron analisando as transições ópticas e eletrônicas conhecidas como *overlap* das funções de onda. Ainda neste capítulo fizemos uma proposta teórica para confinamento interfacial dos portadores, alterando os parâmetros dos materiais, esta proposta foi obtida utilizando Si e GaN na região *core* do nanofio.

No capítulo quatro encontramos os valores das energias de ligação e a energia total de exciton para os nanofios de AlGaAs/GaAs, GaAs/ZnSe, GaN/HfO₂, Si/HfO₂ e Si/SiO₂. Os cálculos foi obtidos através de três aproximações, AP0, AP1 e AP2, os resultados indicam que não é viável negligenciar os efeitos causados pelas cargas imagens em sistemas onde $\epsilon_r < 1$.

E por fim no capítulo cinco, descrevemos as conclusões dos trabalho e algumas perspectivas futuras que são possíveis apartir dos resultados deste trabalho.

No apêndice foi descrito o modelo teórico para os potenciais de auto energia (AP1) e a correção para a energia de ligação (AP2).

Capítulo 2

Modelo Teórico

Fios quânticos com dimensões de alguns nanômetros vem sendo fabricados com as mais diversas técnicas de crescimento de materiais [6, 8, 9]. Com isso, efeitos de confinamento de portadores em nanofios também vem sendo reportados na literatura com as mais sofisticadas técnicas teóricas [13, 37]. Neste capítulo, será desenvolvido o modelo teórico usado para descrever as propriedades eletrônicas de portadores confinados em fios quânticos *core-shell* tipo I, que será empregado no presente trabalho. O modelo está baseado na aproximação Born-Oppenheimer (aproximação adiabática) e também é consistente com o formalismo da teoria da massa efetiva e com a função envelope. A equação de Schrödinger independente do tempo que descreve o movimento das partículas, considera a anisotropia da massa efetiva por meio do operador de energia cinética proposto por BenDaniel e Duck [58]. A solução é obtida por técnicas numéricas de discretização, baseada em diferenças finitas. A energia de ligação do exciton é calculada usando método variacional. Além disso, efeitos de campos magnéticos são considerados no modelo que será desenvolvido neste capítulo. A aproximação da massa efetiva e o formalismo da função envelope foram escolhidos como técnica teórica neste trabalho, tendo em vista a simplicidade do modelo e por fornecer funções de fácil discretização e soluções numéricas que não demandem grande força computacional, como ocorre com modelos teóricos baseados em cálculo *ab initio*, método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, entre outros.

2.1 Introdução

Neste capítulo, investigaremos heteroestruturas com simetrias cilíndricas formadas por um nanofio localizado em uma região que denominamos de *core*, e envolvido por um material dielétrico com diferente constante dielétrica, localizado em uma região que denominamos de *shell*, conforme é ilustrado na Figura 2.1. A interface entre a região *core* e a região *shell* é considerada abrupta em todo o trabalho, de forma que os parâmetros (gap, massa efetiva, constante dielétrica) variam abruptamente do material que forma o *core* para o material que forma o *shell*.

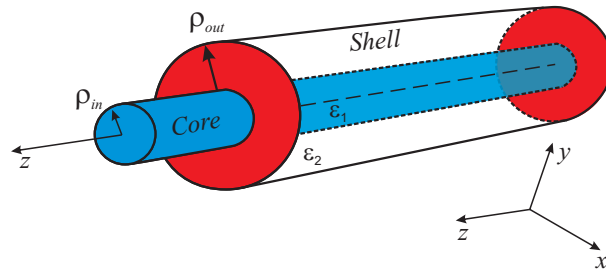


Figura 2.1: Esquema representativo de um fio quântico *core-shell* com interface abrupta, com mobilidade eletrônica ocorre longo do eixo z .

A Figura 2.1 elucida um fio quântico cilíndrico com confinamento de portadores na direção radial e com mobilidade ao longo do eixo z . A região interna do fio (azul) é denominado *core* e a região externa (vermelha) *shell*. O material da região do *core* tem constante dielétrica ε_1 e no *shell* a constante dielétrica é ε_2 . O parâmetro dos materiais é de fundamental importância para o cálculo das propriedades eletrônicas. O raio na região da interface de crescimento entre os materiais é denominado ρ_{in} e ρ_{out} denota o raio externo de todo o nanofio.

2.2 Hamiltoniano do Exciton

O modelo utilizado para o cálculo das propriedades eletrônicas de excitons em fios quânticos *core-shell*, é baseado na solução da equação de autovalores:

$$\mathcal{H}_{exc}\Psi(r_e, r_{h_i}) = E_{exc}\Psi(r_e, r_{h_i}), \quad (2.1)$$

onde E_{exc} é a energia total do exciton ($i = lh, hh$) e \mathcal{H}_{exc} é o operador Hamiltoniano que descreve todas as contribuições de energia:

$$\mathcal{H}_{exc} = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e^*} + \frac{\mathbf{p}_h^2}{2m_h^*} + \Delta E_e(\rho_e) + \Delta E_h(\rho_h) + W(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (2.2)$$

onde $W(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = (\Sigma_e(\rho_e) + \Sigma_h(\rho_h) + W_{dir}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h) + W_{ind}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h))$, descreve os potenciais de interação Coulombiana entre: (i) o portador e as cargas imagens produzidas por ele (potencial de auto-energia $\Sigma_i(\rho_i)$ ($i=el, lh, hh$)); (ii) interação Coulombiana entre elétron e o buraco ($W_{dir}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)$); (iii) as interações entre elétrons e as cargas imagens produzidas pelos buracos e entre o buraco e as cargas imagens produzidas pelo elétron, levando em consideração as devidas correlações eletrônicas das posições do elétron e do buraco ($W_{ind}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)$). $\Delta E_i(\rho_i)$ é o potencial de confinamento de elétrons, $i=el$; e buracos, $i=lh, hh$, que surge devido ao não alinhamento das bandas de energias dos materiais; m_i^* é a massa efetiva do portador i e operador momento \mathbf{p} é definido como:

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad (2.3)$$

usando as eq. (2.3) e eq. (2.2) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{H}_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 + \Delta E_e(\rho_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 + \Delta E_h(\rho_h) + W(r_e - r_h), \quad (2.4)$$

onde o primeiro termo descreve o operador energia cinética do elétron; o segundo termo é o potencial de confinamento de elétrons; o terceiro termo é operador energia cinética de buracos; quarto termo é o potencial que confina buracos e o último termo é a energia potencial devido as interações Coulombianas, levando em consideração a anisotropia da massa efetiva. A eq. (2.4) pode ser expandida desacoplando o movimento ao longo da direção paralela ao plano do fio (ρ, θ), do movimento ao longo do eixo \mathbf{z} , perpendicular ao plano onde ocorreu o confinamento dos portadores, como podemos observar na Figura 2.2, de forma que a eq. (2.4) fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{exc} = & -\frac{\hbar^2}{2m_{e\parallel}^*} \nabla_{e,2D}^2 + \Delta E_e(\rho_e) - \frac{\hbar^2}{2m_{h\parallel}^*} \nabla_{h,2D}^2 + \Delta E_h(\rho_h) + \\ & -\frac{\hbar^2}{2m_{e\perp}^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{h\perp}^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + W(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde o operador $\nabla_{e(h),2D}^2$ atua sobre as coordenadas $\rho_{e(h)}$ e $\theta_{e(h)}$ dos portadores. O termo do potencial de interação Coulombiano $W(r_e, r_h)$ é discutido detalhadamente no Apêndice A. O Hamiltoniano da eq. (2.5) pode ser reescrito em termos das coordenadas do centro de massa, o que é feito por uma mudança de variáveis:

$$z_{cm} = \frac{z_e m_e^\perp + z_h m_h^\perp}{m_e^\perp + m_h^\perp}, \quad (2.6)$$

onde definimos:

$$z = z_e - z_h, \quad (2.7)$$

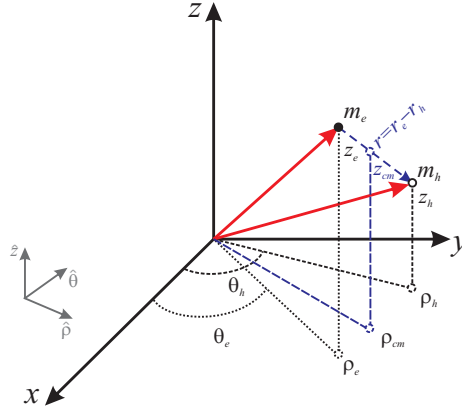


Figura 2.2: Coordenadas do centro de massa do exciton

$$M = m_e^\perp + m_h^\perp, \quad (2.8)$$

o que pode ser escrito nas formas:

$$z_e = z + z_h, \quad (2.9)$$

e

$$z_h = z_e - z, \quad (2.10)$$

substituindo na eq (2.6) e isolando z_e :

$$z_e = z_{cm} + \frac{z m_h^\perp}{M} \quad (2.11)$$

De forma análoga escrevemos z_h ,

$$z_h = z_{cm} - \frac{z m_e^\perp}{M}, \quad (2.12)$$

derivando pela regra da cadeia a eq. (2.11):

$$\frac{\partial}{\partial z_e} = \frac{\partial z}{\partial z_e} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial z_{cm}}{\partial z_e} \frac{\partial}{\partial z_{cm}}, \quad (2.13)$$

onde $\partial z / \partial z_e = 1$ e $\partial z_{cm} / \partial z_e = m_e^\perp / M$, logo:

$$\frac{\partial}{\partial z_e} = \frac{\partial}{\partial z} + \frac{m_e^\perp}{M} \frac{\partial}{\partial z_{cm}}, \quad (2.14)$$

e:

$$\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} = \frac{\partial^2}{\partial z_2} + \frac{2m_e^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial z \partial z_{cm}} + \left(\frac{m_e^\perp}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2}, \quad (2.15)$$

De forma análoga:

$$\frac{\partial^2}{\partial z_h^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2m_h}{M} \frac{\partial^2}{\partial z \partial z_{cm}} + \left(\frac{m_h}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2}. \quad (2.16)$$

Substituindo a eq.(2.15) e eq.(2.16) nos termos que correspondem à energia cinética ao longo do eixo \mathbf{z} do Hamiltoniano da eq.(2.5), obtemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^\perp} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m_e^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial z \partial z_{cm}} + \left(\frac{m_e^\perp}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_h^\perp} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2m_h^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial z \partial z_{cm}} + \left(\frac{m_h^\perp}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2} \right), \end{aligned} \quad (2.17)$$

que pode ser reduzido a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^{*\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^{*\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2}, \quad (2.18)$$

onde o primeiro termo e o segundo dizem respeito aos operadores de energia cinética ao longo do eixo \mathbf{z} , relacionado ao movimento relativo e ao movimento do centro de massa, respectivamente, e $1/\mu^\perp$ é a massa reduzida do exciton:

$$\frac{1}{\mu^\perp} = \frac{1}{m_e^{*\perp}} + \frac{1}{m_h^{*\perp}}, \quad (2.19)$$

O potencial Coulombiano $W(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$, na eq. (2.5) não depende da coordenada do centro de massa z_{cm} , embora seja função da coordenada relativa $z = z_e - z_h$. Assim, a energia do centro de massa é puramente cinética:

$$E_{cm} = \frac{\hbar^2 K_{cm}^2}{2M}, \quad (2.20)$$

onde K_{cm} é um vetor de onda do espaço recíproco, associado ao centro de massa do par elétron-buraco. Por simplicidade, e para transições ópticas de interesse, usamos como referência o ponto Γ , centro da 1ª zona de Brillouin onde $K_{cm} = 0$, de forma que $E_{cm} = 0$. Assim, a eq. (2.18) se resume apenas ao termo que se refere a energia cinética da massa reduzida μ^\perp ao longo do eixo \mathbf{z} ; e a eq. (2.5) fica:

$$\mathcal{H}_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^{*\parallel}} \nabla_{e,2D}^2 + \Delta E_e(\rho_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{*\parallel}} \nabla_{h,2D}^2 + \Delta E_h(\rho_h) - \frac{\hbar^2}{2\mu^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + W(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (2.21)$$

A função de onda total do exciton é uma combinação linear das funções de onda dos portadores e a função de onda que mantém a ligação:

$$\Psi(\rho_e, \rho_h, \theta, z) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{il\theta} \varphi_e(\rho_e) \varphi_h(\rho_h) \phi_{e-h}(z_{e-h}), \quad (2.22)$$

onde $\varphi_e(\rho_e)$ e $\varphi_h(\rho_h)$ são funções de onda normalizadas do elétron e do buraco, respectivamente, e a auto-função $(1/2\pi)^{1/2}e^{il\theta}$ é a solução para a coordenada θ , onde $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, é o número quântico relacionado ao momento angular. Com isto, o Hamiltoniano descrito na eq. (2.21) pode ser expresso como:

$$\mathcal{H}_{exc} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_h + \mathcal{H}_{e-h}(\rho_e, \rho_h, \theta, z), \quad (2.23)$$

sendo $\theta = \theta_e - \theta_h$, a coordenada do movimento relativo na direção angular e $z = z_e - z_h$ a coordenada do movimento relativo na direção do eixo \mathbf{z} . Os dois primeiros termos na eq. (2.23) em coordenadas cilíndricas são:

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_{\parallel i}(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel i}(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i), \quad (2.24)$$

onde $i = e, h$, $\Sigma_i(\rho_i)$ é o potencial de auto energia e o terceiro termo da eq. (2.23) é:

$$\mathcal{H}_{e-h}(\rho_e, \rho_h, \theta, z) = -\frac{\hbar^2}{2\mu^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + W_{dir}(\rho_e - \rho_h) + W_{ind}(\rho_e - \rho_h), \quad (2.25)$$

onde W_{dir} e W_{ind} são detalhadamente explicados no Apêndice A, assim como o termo de auto-energia $\Sigma_i(\rho_i)$. Usando a notação de Dirac [56], a equação de Schrödinger (2.1) que descreve o movimento do exciton pode ser expressa como:

$$\mathcal{H}_{exc} |\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle = E_{exc} |\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle, \quad (2.26)$$

multiplicado-a esquerda por $\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} |$, teremos:

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \mathcal{H}_{exc} |\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle = \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | E_{exc} |\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle \quad (2.27)$$

que, usando a eq. (2.23), resulta em:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \mathcal{H}_{exc} |\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle &= \langle \varphi_e | \mathcal{H}_e | \varphi_e \rangle + \langle \varphi_h | \mathcal{H}_h | \varphi_h \rangle \\ &+ \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \mathcal{H}_{e-h} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

como $|\varphi_e\rangle$ e $|\varphi_h\rangle$ são ortonormais, então, $\langle\varphi_e|\varphi_e\rangle = \langle\varphi_h|\varphi_h\rangle = 1$. As equações $\langle\varphi_e|\mathcal{H}_e|\varphi_e\rangle = E_e$ e $\langle\varphi_h|\mathcal{H}_h|\varphi_h\rangle = E_h$, são resolvidas numericamente através de técnicas de discretização por diferenças finitas e a equação referente a energia de ligação do exciton,

$$\langle\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}|\mathcal{H}_{e-h}|\varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h}\rangle = E_b,$$

é resolvida usando método variacional com um parâmetro. A solução das eq. (2.28) nos dá a energia total de exciton:

$$E_{exc} = E_g + E_e + E_h - |E_b|, \quad (2.29)$$

onde a subtração do valor absoluto da energia de ligação é usado para garantir que esta energia é perdida pelo sistema elétron-buraco.

2.3 Hamiltoniano do portador com campo magnético na direção do eixo z

Ao longo do desenvolvimento apresentado para o Hamiltoniano do exciton, não consideramos em nenhum momento, a presença de campos externos. O campo magnético presente nesta heteroestrutura altera o Hamiltoniano de cada portador por meio do potencial vetor \mathbf{A} , que podemos expressar como:

$$\mathcal{H}_i = (\mathbf{p}_i - q\mathbf{A})\frac{1}{2m}(\mathbf{p}_i - q\mathbf{A}) + \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i), \quad (2.30)$$

onde tomamos $q = -e$ (carga elementar) e o Hamiltoniano \mathcal{H}_i pode ser reescrito como:

$$\mathcal{H}_i = \frac{1}{2m_i}(\mathbf{p}_i^2 + 2e\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_i + e^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}) + \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i), \quad (2.31)$$

Tomando um *gauge* simétrico para o potencial vetor $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\mathbf{e}_\theta$,¹ teremos para cada termo individualizado da eq. (2.31):

$$\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i}\frac{\partial}{\partial\rho_i}\left(\frac{\rho_i}{m^{\parallel}_i(\rho_i)}\frac{\partial}{\partial\rho_i}\right) - \frac{\hbar^2}{2m^{\parallel}_i(\rho_i)\rho_i^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta_i^2}, \quad (2.32)$$

$$\frac{1}{2m_i}(2e\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_i) = \frac{\hbar}{i}\frac{eB}{2m_i^{\parallel}}\frac{\partial}{\partial\theta_i}, \quad (2.33)$$

e por fim:

¹o *gauge* escolhido se justifica por sua simplicidade, e por descrever bem o comportamento do campo magnético na direção do eixo z. Além disso este mesmo *gauge* vem sendo amplamente usado na literatura [13, 59]

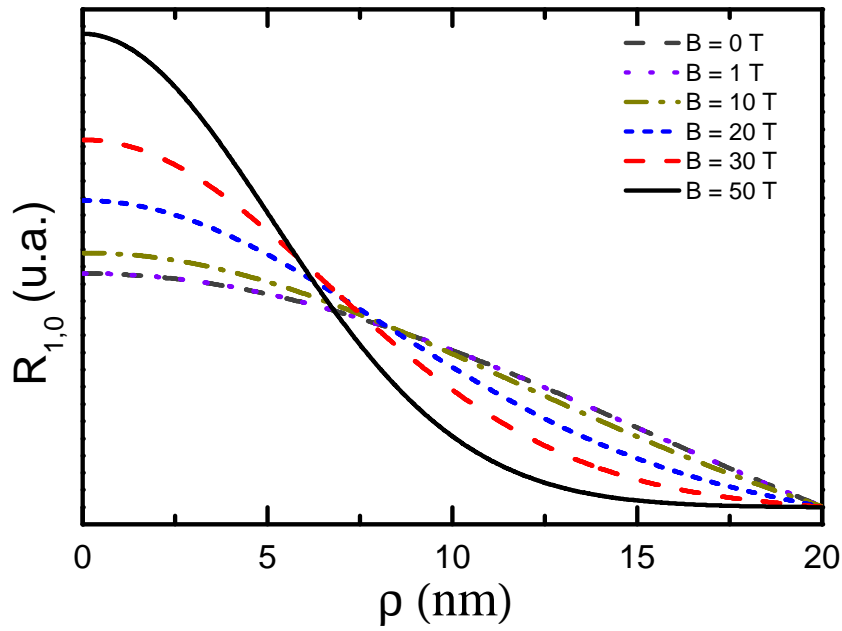


Figura 2.3: Função de onda no estado fundamental de um elétron em um nanofio circular de raio $R=20 \text{ nm}$, para varios valores de campos magnéticos B .

$$\frac{e^2 \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}{2m_i} = \frac{e^2 B^2}{8m_i^{\parallel}} \rho_i^2, \quad (2.34)$$

de modo que o Hamiltoniano fica:

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^{\parallel}(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_i^{\parallel}(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} + \frac{\hbar}{i} \frac{eB}{2m_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \frac{e^2 B^2}{8m_i^{\parallel}} \rho_i^2 + \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i), \quad (2.35)$$

onde $\omega_c = e\mathbf{B}/m_i^{\parallel}$ é definido como frequência de ciclotron então o Hamiltoniano toma a forma final:

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^{\parallel}(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_i^{\parallel}(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} + \frac{\hbar\omega_c}{2i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \frac{m_i^{\parallel} \omega_c^2 \rho_i^2}{8} + \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i). \quad (2.36)$$

A Figura 2.3 ilustra o efeito de diferentes intensidades de campos magnéticos sobre a função de um elétron, em comparação com um estado confinado não perturbado pelo campo, $B = 0 \text{ T}$.

2.4 Método Variacional

A energia de ligação do exciton é calculada usando método variacional com um parâmetro. A função de onda $\phi_{e-h}(z_{e-h})$ é do tipo gaussiana [43, 60, 61, 62, 63]:

$$\phi_{e-h}(z_{e-h}) = \frac{1}{\tau^{1/2}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{z^2}{\tau}\right), \quad (2.37)$$

onde τ é o parâmetro variacional que minimiza a energia do exciton. A energia de ligação é calculada a partir de:

$$\langle \varphi_e \varphi_h \phi_{e-h} | \mathcal{H}_{e-h} | \varphi_e \varphi_h \phi_{e-h} \rangle = E_b, \quad (2.38)$$

onde o Hamiltoniano \mathcal{H}_{e-h} foi definido na eq. (2.25), então:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \mathcal{H}_{e-h} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \frac{d^2}{dz^2} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle + \\ &\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{dir} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle + \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{ind} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle = E_b \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde o primeiro termo do segundo membro desta equação fica:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \frac{d^2}{dz^2} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp \tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} \frac{d^2}{dz^2} e^{-\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp \tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{2}{\tau^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} dz + \frac{4}{\tau^4} \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} dz \right] \end{aligned} \quad (2.40)$$

As integrais acima são Gaussianas e tem como solução [64]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.41)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.42)$$

logo a solução da eq. (2.40) fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \frac{d^2}{dz^2} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^\perp \tau^2} \quad (2.43)$$

O segundo termo do segundo membro na eq. (2.39) depende do potencial W_{dir} que representa o potencial de interação Coulombiana entre o elétron e o buraco. Este termo depende tanto das coordenadas do elétron quanto das coordenadas do buraco e é definido por:

$$W_{dir}(\rho_e, \rho_h, \theta_e, \theta_h, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{(\rho)}\varepsilon_0\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2}} \quad (2.44)$$

onde ε_0 é a constante dielétrica do vácuo e $\varepsilon_{(\rho)}$ é a constante dielétrica do *core*, para $\rho \leq \rho_{in}$ e a constante dielétrica do *shell* para $\rho \geq \rho_{in}$. Com isso podemos escrever:

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{dir} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle = \\ & -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{(\rho)}\varepsilon_0} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | \frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2}} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

ou na forma de integral:

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{dir} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle \\ & = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{(\rho)}\varepsilon_0} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_e d\rho_e d\theta_e \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_h d\rho_h d\theta_h \int_{-\infty}^{+\infty} dz (\varphi_e \varphi_h)^* \\ & \quad \times \left(\frac{\left(\frac{1}{\tau^{1/2}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\left(\frac{z}{\tau}\right)^2}\right) \times \left(\frac{1}{\tau^{1/2}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\left(\frac{z}{\tau}\right)^2}\right)}{\left(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2\right)^{\frac{1}{2}}} \right) (\varphi_e \varphi_h) \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} & = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_{(\rho)}\varepsilon_0\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_e d\rho_e d\theta_e \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_h d\rho_h d\theta_h \\ & \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\varphi_e|^2 |\varphi_h|^2 e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2}}{\left(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2\right)^{\frac{1}{2}}} dz \end{aligned} \quad (2.47)$$

O integrando em \mathbf{z} é uma função par, de forma que pode-se integrar nos limites de 0 a $+\infty$ e multiplicar por 2, além disso, usa-se as coordenadas relativas $\theta = \theta_e - \theta_h$ e $z = z_e - z_h$ de forma que:

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{dir} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle = \\ & -\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_{(\rho)}\varepsilon_0\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} dz d\theta}{\left(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos\theta + z^2\right)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned} \quad (2.48)$$

A integral em \mathbf{z} pode ser resolvida usando uma relação de recorrência:

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-u}}{\sqrt{u(a+u)}} du = e^{-\frac{a}{2}} K_0\left(\frac{a}{2}\right) \quad (2.49)$$

onde usamos $u = \frac{2z^2}{\tau}$ e K_0 é uma função modificada de Bessel de ordem zero [64]. Deste modo a solução da integral em \mathbf{z} fica igual ao que foi mostrado na eq. (2.49), e a eq. (2.48) fica:

$$\langle \varphi_e \varphi_h \phi_{e-h} | W_{dir} | \varphi_e \varphi_h \phi_{e-h} \rangle = -\frac{e^2}{2\pi \varepsilon_{(\rho)} \varepsilon_0 \tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} e^{-\frac{a}{2}} K_0\left(\frac{a}{2}\right) d\theta \quad (2.50)$$

onde $a = \frac{2}{\tau}(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos\theta)$ é sempre positivo de forma que a eq. (2.50) possa ser satisfeita; (para $\theta = 0$, $a = \frac{2}{\tau}(\rho_e - \rho_h)^2$ e para $\theta = \pi$, $a = \frac{2}{\tau}(\rho_e + \rho_h)^2$).

O último termo do segundo membro da eq. (2.39) fica:

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} | W_{ind} | \varphi_e, \varphi_h, \phi_{e-h} \rangle = \frac{1}{\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_e^* \varphi_h^* e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} W_{ind} \varphi_e \varphi_h \rho_e \rho_h d\rho_e d\rho_h d\theta dz \quad (2.51)$$

Usando as eq. (2.51), (2.50), (2.43) e (2.39) podemos reescrever a energia de ligação do exciton expressa por (2.38) como:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^{\perp} \tau^2} - \frac{e^2}{2\pi \varepsilon_{(\rho)} \varepsilon_0 \tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} e^{-\frac{a}{2}} K_0\left(\frac{a}{2}\right) d\theta + \\ \frac{1}{\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W_{ind} |\varphi_e|^2 |\varphi_h|^2 e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} \rho_e \rho_h d\rho_e d\rho_h d\theta dz = E_b \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde as integrais são resolvidas por meio de métodos numéricos. O potencial W_{ind} depende das posições do elétron e do buraco e é discutido no Apêndice A.

2.5 Solução numérica da equação de Schrödinger bidimensional

Neste trabalho são utilizadas técnicas de discretização numérica por diferenças finitas para calcular autofunções e autovalores a partir da equação de Schrödinger independente do tempo. Um dos motivos para a escolha desta técnica é o fato da massa efetiva ter dependência espacial e pelo fato do potencial ser descontínuo nas regiões interfaciais.

A equação de Schrödinger que descreve o movimento do portador é dada pela eq. (2.1) levando-se em consideração o momento angular do portador pode-se reescrever a eq. (2.1) como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m_i(\rho)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m_i(\rho)\rho^2} + V_T(\rho) \right] \Psi_i(\rho_i) = E \Psi_i(\rho_i), \quad (2.53)$$

onde $i = e, lh$ e hh , $V_T(\rho) = \Delta E_i(\rho) + \Sigma_i(\rho_i)$. Para facilitar o processo de discretização, reescrevemos a equação de Schrödinger acima em uma equação adimensional, usando as seguintes variáveis adimensionais:

$$r = \frac{\rho}{a_0} \quad (a)$$

$$\mu(r) = \frac{m_0}{m(\rho)} \quad (b)$$

$$U(r) = \frac{1}{R_y} \left[\frac{\hbar^2 l^2}{2m(\rho)\rho^2} + V_T(\rho) \right] \quad (c)$$

$$\bar{E} = \frac{E}{R_y} \quad (d) \quad (2.54)$$

onde $R_y = m_0 e^4 / 2\hbar^2$ é a constante de Rydberg, $a_0 = \hbar^2 / m_0 e^2$ é o raio de Bohr e m_0 é a massa de repouso do elétron. Em termos destas variáveis adimensionais a eq. (2.53) fica expressa como:

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu(r) \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r) \right] \Psi(r) = \bar{E} \Psi(r) \quad (2.55)$$

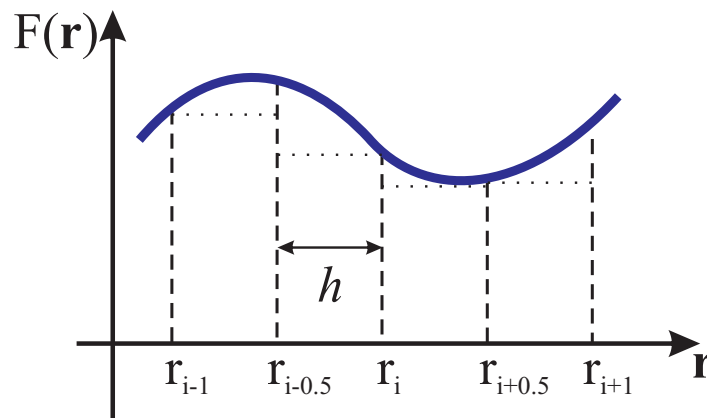


Figura 2.4: *grid* da função de onda, onde h é o tamanho de cada passo numérico e i é o ponto de referência dos valores espaciais.

Para que o esquema de diferenças finitas seja aplicado, define-se um *grid* de pontos com espaçamento variável na direção radial, r_i ($i = 1, 2, \dots, N$), conforme ilustrado na Figura 2.4:

Para discretização da eq. (2.55) nesta *grid*, integra-se ambos os membros da equação no intervalo $r_{i-1/2} < r < r_{i+1/2}$

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2} r dr \left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \mu(r) \frac{d}{dr} \right) + U(r) \right] \Psi(r) = \int_{i-1/2}^{i+1/2} r dr \bar{E} \Psi(r) \quad (2.56)$$

Integrando-se fica:

$$\begin{aligned} -r_{i+1/2} \mu_{i+1/2} \frac{d\Psi(r)}{dr} \Big|_{i+1/2} + r_{i-1/2} \mu_{i-1/2} \frac{d\Psi(r)}{dr} \Big|_{i-1/2} &= \\ &= \frac{(\bar{E} - U_i)}{2} [r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2] \Psi_i \end{aligned} \quad (2.57)$$

Usando a definição de derivadas:

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{x \rightarrow \Delta x} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2.58)$$

que pode ser expressa como:

$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f_{i+0.5} - f_{i-0.5}}{x_{i+0.5} - x_{i-0.5}} \quad (2.59)$$

e aplicando esta definição na eq. (2.57) teremos para a primeira derivada da eq. (2.57):

$$\frac{d\Psi(r)}{dr} \Big|_{i+1/2} = \left[\frac{h_{i+1} \Psi_{i+1}}{h_{i+1} (r_{i+1} - r_i)} - \frac{h_i \Psi_i}{h_i (r_{i+1} - r_i)} \right] \quad (2.60)$$

e para a segunda:

$$\frac{d\Psi(r)}{dr} \Big|_{i-1/2} = \left[\frac{h_i \Psi_i}{h_i (r_i - r_{i-1})} - \frac{h_{i-1} \Psi_{i-1}}{h_{i-1} (r_i - r_{i-1})} \right] \quad (2.61)$$

Os termos das eq. (2.60) e eq. (2.61) foram multiplicados e divididos por um h que representa o tamanho do passo discretizante. Identificamos o último termo da eq. (2.57) ($[r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2]/2$) como h_i . Aplicando as eq. (2.60) e eq. (2.61) na eq. (2.57) e as considerações feitas para o último termo desta equação teremos:

$$\begin{aligned} -r_{i+1/2} \mu_{i+1/2} \left[\frac{h_{i+1} \Psi_{i+1}}{h_{i+1} (r_{i+1} - r_i)} - \frac{h_i \Psi_i}{h_i (r_{i+1} - r_i)} \right] \\ + r_{i-1/2} \mu_{i-1/2} \left[\frac{h_i \Psi_i}{h_i (r_i - r_{i-1})} - \frac{h_{i-1} \Psi_{i-1}}{h_{i-1} (r_i - r_{i-1})} \right] \\ = (\bar{E} - U_i) h_i \Psi_i. \end{aligned} \quad (2.62)$$

definindo:

$$\begin{aligned}\chi_i &= h_i \Psi_i & (a), \\ \bar{\mu}_i &= \frac{1}{2(r_i - r_{i-1})} (r_i \mu_i + r_{i-1} \mu_{i-1}) & (b),\end{aligned}\tag{2.63}$$

reagrupando os termos definidos na eq. (2.63) e aplicando-os na eq. (2.62), teremos:

$$-\frac{\bar{\mu}_i}{h_{i-1}h_i}\chi_{i-1} + \left[\frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i^2} + \frac{\bar{\mu}_i}{h_i^2} + U_i \right] \chi_i - \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i h_{i+1}} \chi_{i+1} = \bar{E} \chi_i,\tag{2.64}$$

que podemos escrever na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \chi_{i-1} \\ \chi_i \\ \chi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \bar{E} \begin{pmatrix} \vdots \\ \chi_{i-1} \\ \chi_i \\ \chi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix},\tag{2.65}$$

onde:

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i^2} + \frac{\bar{\mu}_i}{h_i^2} + U_i & (a), \\ \beta_i &= \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i h_{i+1}} & (b),\end{aligned}\tag{2.66}$$

O Hamiltoniano nesta representação é descrito por uma matriz tridiagonal simétrica de ordem $N \times N$, e as autofunções são matrizes coluna de ordem N . Podemos notar que qualquer termo adicional na direção de \mathbf{z} , como potenciais devido a campos externos, são inclusos na diagonal principal α_i da matriz. Os autovalores \bar{E} e autovetores χ_i são obtidos numericamente, utilizando as rotinas computacionais DSTEVD e LAPACK.

Havendo uma *grid* uniforme, (onde os valores de h , são sempre constantes), temos que:

$$\begin{aligned}r_i - r_{i-1} &= r_{i+1/2} - r_{i-1/2} = h, \\ h_i &= \sqrt{h},\end{aligned}\tag{2.67}$$

Considerando que as massas não tenham pontos de singularidades, podemos descrever, $\bar{\mu}_i = (\mu_i + \mu_{i+1})/2$ e também, $\bar{\mu}_{i-1/2} = (\mu_{i-1} + \mu_i)/2$, de modo que obtemos:

$$\bar{\mu}_i = \frac{\mu_{i-1/2}}{h} = \frac{1}{2h} (\mu_i + \mu_{i-1}),\tag{2.68}$$

e também,

$$\bar{\mu}_{i+1} = \frac{\mu_{i+1/2}}{h} = \frac{1}{2h} (\mu_{i+1} + \mu_i), \quad (2.69)$$

deste modo, os termos da eq. (2.66) podem ser reescritos como:

$$\alpha_i = \frac{1}{2h^2} (\mu_{i-1} + 2\mu_i + \mu_{i+1}) + U_i \quad (a),$$

$$\beta_i = \frac{1}{2h^2} (\mu_{i+1} + \mu_i) \quad (b), \quad (2.70)$$

o que está de acordo com a literatura [65].

Capítulo 3

Confinamento Interfacial em fios quânticos *core-shell* com altas constantes dielétricas

Neste capítulo realizamos um estudo de nanofios formados por materiais com diferentes constantes dielétricas na região *core* e *shell*. O modelo teórico consiste na solução da equação de Schrödinger independente do tempo em coordenadas cilíndricas, levando-se em conta a aproximação adiabática, aproximação da massa efetiva, o formalismo da função envelope e efeitos do potencial de auto energia. O potencial de auto energia é obtido por meio do método da carga imagem, baseado na solução da equação de Poisson em coordenadas cilíndricas. O efeito do potencial de auto energia modifica o confinamento de portadores de uma forma tal que modelos usuais para estudos de confinamento não se aplicam em fios quânticos com elevada diferença entre as constantes dielétricas. Além disso, estudamos as respostas dos portadores a um campo magnético aplicado na direção paralela ao eixo do fio.

3.1 Introdução

Do ponto de vista tecnológico, materiais semicondutores com Si, GaN, AlGaAs, GaAs, ZnSe, entre outros, são de grande importância para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e vem sendo empregados pela indústria eletrônica desde a década de 60. Com o avanço da tecnologia (tendo como base sólida ciências como física, química e engenharia de materiais) o desenvolvimento de novos dispositivos vem possibilitando aplicações cada vez mais avançadas que por sua vez vem provocando mudanças significativas no comportamento social, revolucionando meios de comunicação e mexendo com a economia global. Com isto, os estudos destes sistemas são de grande importância tanto do ponto de vista acadêmico quanto no ponto de vista da aplicação tecnológica. Devido à crescente redução da dimensionalidade das estruturas físicas que constituem tais sistemas, torna-se imprescindível o tratamento quântico para o entendimento das propriedades eletrônicas, ópticas e de transporte de cargas em materiais semicondutores com dimensionalidades reduzidas.

3.2 Fios quânticos semicondutores com efeito de potencial de auto energia

Neste trabalho, fios quânticos *core-shell* são estudados por meio da solução da equação de Schrödinger, usando aproximações descritas no Capítulo 2, e a solução da equação de Poisson descrita no Apêndice A. Os materiais usados são todos de grande importância para a indústria eletrônica e os seus principais parâmetros (gaps, constantes dielétricas e massas efetivas dos portadores) estão descritos na Tabela 3.1. As heteroestruturas que formam os fios quânticos *core-shell* são listados na Tabela 3.2, com as respectivas razões entre as constantes dielétricas dos materiais. Como pode-se observar, a diferença entre as constantes dielétricas, usualmente denominada *dielectric mismatch*, é muito grande em algumas estruturas, enquanto que em outras essa diferença é desprezível. Se a razão $\varepsilon_r = \varepsilon_1/\varepsilon_2$ é muito diferente de 1, o potencial de auto energia modifica consideravelmente o perfil do potencial de confinamento dos portadores, conforme pode ser observado na Figura 3.1, a qual ilustra os perfis dos potenciais de confinamento de elétrons, com e sem efeito de carga imagem, além do perfil do potencial de auto energia. Se $\varepsilon_r \approx 1$, o efeito do potencial de auto energia é insignificante, produzindo apenas uma leve suavização do perfil do potencial, conforme ilustra a Figura 3.1, para o fio $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ ($\varepsilon_r = 1.07$). Se $\varepsilon_r > 1$, de acordo com os métodos das imagens, uma partícula confinada no interior do fio sente o potencial repulsivo por estar localizada na região de constante dielétrica maior. Na região *shell* a partícula sente um potencial atrativo por estar em uma região de menor constante dielétrica, conforme ocorre com o fio Si/SiO_2 ($\varepsilon_r = 3$). Se $\varepsilon_r < 1$, então os portadores sentem um potencial atrativo no *core*, por estarem localizados em uma região onde a constante dielétrica é menor e sentem um potencial repulsivo na região *shell* onde a constante dielétrica é maior. Uma consequência do potencial atrativo (repulsivo) na região do *core* (*shell*) é o aparecimento de cúspides na região de torno da interface de fios com $\varepsilon_r < 1$ como é o caso dos perfis do fio GaN/HfO_2 ($\varepsilon_r = 0.38$) e Si/HfO_2 ($\varepsilon_r = 0.47$),

ilustrados na Figura 3.1.

Tabela 3.1: - Parâmetros dos materiais: gap de energia em eV , constantes dielétricas, massa efetiva dos elétrons (m_e^{\parallel}), buracos leves (m_{lh}^{\parallel}) e buracos pesados (m_{hh}^{\parallel}) para silício (Si), arseneto de gálio (GaAs), arseneto de gálio alumínio ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As$), óxido de silício (SiO_2) e óxido de háfnio (HfO_2). [68, 69, 70, 71].

Materiais	$E_g(eV)$	$\varepsilon/\varepsilon_0$	m_e^{\parallel}/m_0	m_{hh}^{\parallel}/m_0	m_{lh}^{\parallel}/m_0
Si	1.12	11.7	0.173	0.533	0.147
GaAs	1.425	12.91	0.067	0.377	0.090
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$	1.805	12.06	0.092	0.408	0.125
SiO_2	8.9	3.9	0.300	5.000	5.000
HfO_2	5.8	25.0	0.836	0.871	0.580
ZnSe	2.82	7.6	0.170	0.378	0.0905
GaN	3.3	9.5	0.190	0.860	0.270

A energia de referência do potencial é tomada com relação ao nível zero do potencial devido as bandas de energia $\Delta E_i(\rho_i)$, como ilustrado na Figura 3.1. Quando o potencial de auto energia $\Sigma_i(\rho_i)$ é considerado, o menor valor do potencial total $V_T = \Delta E_i(\rho_i) + \Sigma_i(\rho_i)$ será maior (menor) que zero se $\varepsilon_r > 1$ ($\varepsilon_r < 1$). Isto se deve à característica repulsiva (atrativa) do potencial na região do *core* em heteroestruturas com $\varepsilon_r > 1$ ($\varepsilon_r < 1$). Com isto, o efeito do potencial $\Sigma_i(\rho_i)$ aumenta a energia dos portadores em fios com $\varepsilon_r > 1$ e diminui em fios com $\varepsilon_r < 1$, conforme podemos observar na Figura 3.2. Assim, em fios *core-shell* como em Si/ SiO_2 e GaAs/ZnSe o potencial $\Sigma_i(\rho_i)$ suaviza o perfil do potencial V_T aumentando a energia do portador e a densidade de probabilidade de encontrá-lo no centro do fio. À medida que o raio do fio aumenta nestes sistemas, o efeito do potencial $\Sigma_i(\rho_i)$ diminui consideravelmente. Do ponto de vista do método das cargas imagem, isto ocorre porque a medida que o raio do fio aumenta, as imagens tendem a ficar mais espaçadas uma das outras e do portador que as geram, diminuindo portanto o efeito do potencial de auto energia, o qual é do tipo Coulombiano.

O aumento da energia devido à $\Sigma_i(\rho_i)$ pode ser melhor observado nos valores da Tabela 3.3, que compara as energias de elétrons e de buracos pesados, com e sem efeito do potencial $\Sigma_i(\rho_i)$

Tabela 3.2: razões entre as constantes dielétricas (ε_r).

Materiais	$\varepsilon_1/\varepsilon_2$
GaN/ HfO_2	0.38
Si/ HfO_2	0.47
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ /GaAs	1.07
GaAs/ZnSe	1.66
Si/ SiO_2	3.00

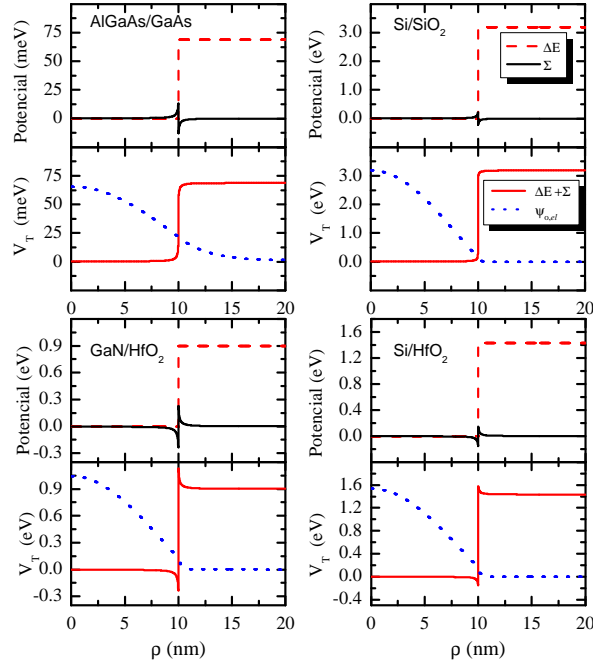


Figura 3.1: Perfil do potencial de confinamento em fios quânticos $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, Si/SiO_2 , GaN/HfO_2 e Si/HfO_2 , linhas azuis - projeções das funções de onda dos portadores.

Tabela 3.3: Energia de elétrons e buracos pesados no Estado Fundamental (E.F) e no Primeiro Estado Excitado (1ºE.) em fios *core-shell*, GaN/HfO_2 , Si/HfO_2 , $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ e Si/SiO_2 sem (**AP0**) e com (**AP1**) efeito do potencial de auto energia.

R	GaN/HfO_2		Si/HfO_2		$\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$		Si/SiO_2	
	AP0	AP1	AP0	AP1	AP0	AP1	AP0	AP1
Elétron								
4 nm (E.F.)	46.14	26.39	53.52	41.02	53.27	53.62	67.44	92.39
4 nm (1ºE.)	259.34	230.76	296.60	278.64	68.85	68.86	355.73	383.53
10 nm (E.F.)	9.58	3.12	10.78	6.64	18.84	19.25	11.91	21.48
10 nm (1ºE.)	50.87	41.09	57.14	50.95	68.85	68.87	62.74	74.21
Buraco Pesado								
4 nm (E.F.)	14.78	0.08	23.71	13.96	18.34	19.26	21.78	47.12
4 nm (1ºE.)	77.86	57.71	124.94	111.48	45.13	45.14	115.58	146.70
10 nm (E.F.)	2.48	-3.37	3.99	0.27	4.39	4.81	3.85	13.31
10 nm (1ºE.)	13.07	5.68	21.04	16.15	22.59	23.08	20.33	31.78

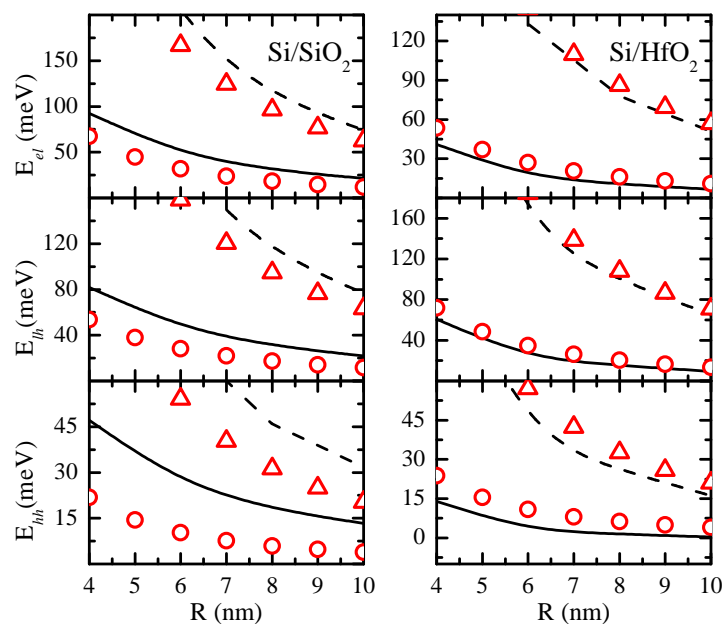


Figura 3.2: Energia dos portadores em fios Si/SiO₂ (esquerda) e Si/HfO₂ (direita). As linhas sólidas e tracejadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, com efeito do potencial de auto energia. Os símbolos \circ e Δ representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, sem efeito do potencial de auto energia.

para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado, em poços estreitos ($R = 4 \text{ nm}$) e poços largos ($R = 10 \text{ nm}$). Em fios Si/SiO₂ com raio $R = 4 \text{ nm}$ a energia do elétron, no estado fundamental, sofre um aumento de 24.95 meV devido ao efeito do potencial de auto energia. Para o primeiro estado excitado a diferença é de 27.8 meV . Em fios com raio $R = 10 \text{ nm}$ a diferença na energia do elétron diminui para 9.57 meV no estado fundamental e 11.47 meV no primeiro estado excitado. O estado fundamental do buraco pesado aumenta em 25.34 meV e o primeiro estado excitado aumenta em 31.12 meV ($R = 4 \text{ nm}$). Em poços largos ($R = 10 \text{ nm}$) o estado fundamental do buraco pesado aumenta em 9.46 meV e para o primeiro estado excitado aumenta em 11.45 meV . Com isto, em sistemas com $\epsilon_r > 1$, o efeito provocado pelo potencial de auto energia sobre as propriedades eletrônicas dos portadores é de natureza quantitativa, conforme pode ser observado na Figura 3.2.

Como esperado, em fios Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs ($\epsilon_r = 1.07$) o efeito do potencial de auto energia é irrelevante. Neste sistema os estados excitados do elétron e do buraco leve têm energias acima do valor do potencial de confinamento. O primeiro estado excitado do buraco pesado tende para um estado ligado a medida que o raio do poço aumenta. Estes resultados estão plotados na Figura 3.3.

Para nanofios de Si/HfO₂ ($\epsilon_r = 0.47$) estreitos ($R = 4 \text{ nm}$) a diferença na energia dos elétrons é de 12.5 meV e 17.96 meV para o estado fundamental e primeiro estado excitado,

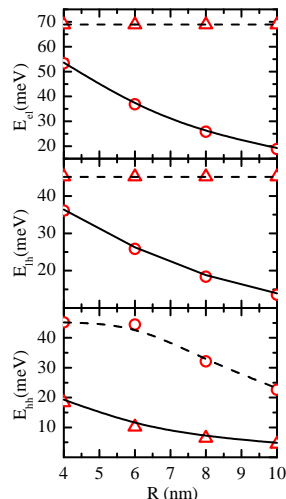


Figura 3.3: Energia dos portadores em fios $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$. As linhas sólidas e tracejadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, com efeito do potencial de auto energia. Os símbolos \circ e Δ representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente, sem efeito do potencial de auto energia.

respectivamente. Em poços largos ($R = 10 \text{ nm}$) a diferença diminui para 4.14 meV no estado fundamental e 6.19 meV no primeiro estado excitado. No estado fundamental do buraco pesado a diferença é igual a 9.75 meV ($R = 4 \text{ nm}$) e 3.72 meV ($R = 10 \text{ nm}$). No primeiro estado excitado a diferença é de 13.46 meV ($R = 4 \text{ nm}$) e 4.89 meV ($R = 10 \text{ nm}$). Diferente do que ocorre em sistemas com $\varepsilon_r > 1$ essas diferenças são negativas, ou seja, o potencial de auto energia diminui a energia dos portadores em sistemas com $\varepsilon_r < 1$. Além disso, as funções de ondas dos portadores são mais espalhadas na região *core*, tendo em vista que as cúspides, devido ao potencial de auto energia, as atraem para as regiões interfaciais.

A atração interfacial é mais evidente em fios *core-shell* GaN/HfO_2 . A Figura 3.4 mostra a energia e as funções de onda do estado fundamental de *el*, *lh* e *hh* confinados em fios *core-shell* com diferentes valores de raios e com efeito do potencial de auto energia. As curvas no gráfico indicam que o modelo ideal para cálculo de energia em fios quânticos, dado pela relação $E \approx \chi_{n,l}^2/R^2$, onde $\chi_{n,l}$ é a n -ésima raiz da função de Bessel de ordem l e R é o raio do fio, não se aplica a fios *core-shell* GaN/HfO_2 . Fenomenologicamente, as cargas imagem induzidas, criam um potencial acentuado e atrativo na região *core* (e repulsivo na região *shell*) que puxa o portador para a região das interfaces. A força deste potencial é tão grande quando menor for a razão ε_r .

Os resultados mostram que no caso do buraco pesado a energia no estado fundamental decresce até atingir um mínimo, em $R \approx 8.4 \text{ nm}$, e em seguida crescem assintoticamente em direção a zero, exibindo comportamento diferente do convencional ($E \approx \chi_{n,l}^2/R^2$), o que indica a existência de diferentes regimes de confinamento em fios GaN/HfO_2 estreitos ($R < 10 \text{ nm}$) e em fios largos ($R > 10 \text{ nm}$). Isto pode ser melhor observado no comportamento das funções de onda plotadas na Figura 3.4 para *el*, *lh* e *hh*. Em fios estreitos elétrons e buracos estão confinados espacialmente na região do *core*. Por outro lado, em fios largos o comportamento

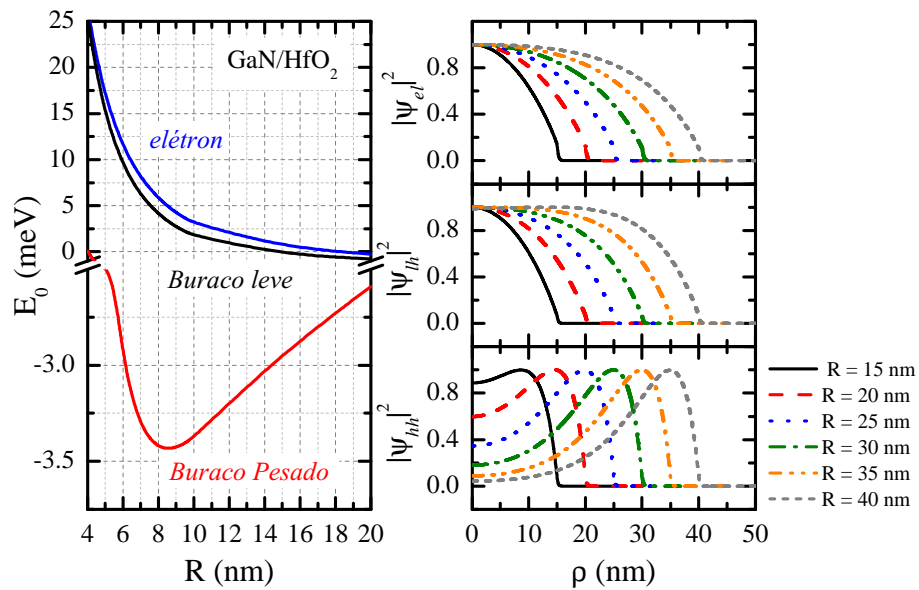


Figura 3.4: Esquerda: Estado fundamental dos portadores em fio *core-shell* GaN/HfO₂. Direita: Funções de onda normalizadas de *el*, *lh* e *hh* para raios de fios entre 15 e 40 *nm*.

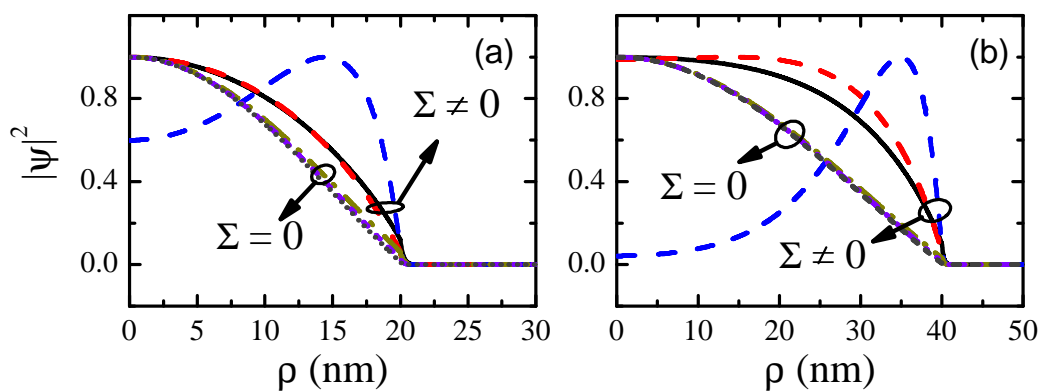


Figura 3.5: (a) Funções de onda em GaN/HfO₂ com raio (a) $R = 20$ *nm* e (b) $R = 40$ *nm*, elétron (linha sólida preta), buraco leve (linha tracejada vermelha), buraco pesado (linha tracejada azul) com efeito de carga imagem e elétron (traceja ponto amarelo), buraco leve (tracejado violeta) e buraco pesado (pontilhados cinza) sem efeito de carga imagem.

das funções de onda indicam que elétrons e buracos leves estão espacialmente separados do buraco pesado, o qual está confinado na interface. Um comportamento semelhante a este é observado em fios *core-shell* tipo II.

Para os valores de raios investigados não foi observado confinamento de elétrons e buracos leves na região interfacial, embora para raios de maiores valores as funções de onda destes portadores ficam mais espalhadas quando levamos em consideração o potencial de auto energia, conforme plotado na Figura 3.5 para as funções de onda normalizadas do elétron (ψ_{el}), buraco leve (ψ_{lh}) e buraco pesado (ψ_{hh}). O confinamento interfacial de elétrons e buracos leves não foi observado devido a um conjunto de fatores que influenciam este comportamento: (i) massa efetiva do portador (m_i^{\parallel}), (ii) razão entre as constantes dielétricas (ε_r) e (iii) potencial de confinamento do portador (ΔE_i). A razão de não ocorrer confinamento interfacial de portadores em fios estreitos é uma consequência da altura do potencial $\Delta E_{e,h}$ que confina estes portadores. Mesmo com o potencial de auto energia atuando no sistema, o efeito do potencial $\Delta E_{e,h}$ devido as diferenças de bandas sobrepõe o potencial $\Sigma_{e,h}$ devido às cargas imagem. Em fios largos as cargas imagem estão mais separadas uma das outras e do centro do fio, devido a isso o potencial atua mais fortemente na região de interface espalhando as funções de ondas dos portadores, como mostrado na Figura 3.5.

Os efeitos de confinamento interfaciais afetam drasticamente as propriedades ópticas em fios *core-shell* GaN/HfO₂. A partir de certo tamanho de raio o *overlap* da função de onda do elétron com a função de onda do buraco ($|\langle \psi_e | \psi_h \rangle|^2$) diminui, principalmente para o buraco pesado. Isso se dá porque o elétron tem massa menor que o buraco pesado e este é mais atraído para a região da interface. Quando o raio do fio aumenta, os níveis de energia caem e o buraco se confina mais ainda na interface. Como o elétron e o buraco pesado estão espacialmente confinados em regiões diferentes o *overlap* fica bem abaixo de 1. Estes resultados estão plotados no gráfico da Figura 3.6. O *overlap* das funções de onda é proporcional à probabilidade do elétron recombinar com o buraco, e a intensidade do pico de luminescência, devido a uma transição elétron-buraco, depende da probabilidade de recombinação dos portadores. Como a queda do *overlap* é mais intensa para buraco pesado do que para buraco leve, estes resultados indicam que uma transição elétron-buraco leve é mais provável que uma transição elétron-buraco pesado. Assim, o pico de luminescência do elétron-buraco leve será mais intenso.

A energia de recombinação $E_R^{e-h} = E_g + E_e + E_h$, ($h = lh, hh$), definida pela soma da energia do gap na região *core* com as energias do elétron e do buraco, é calculada para o estado fundamental ($n = 0, l = 0$), permitindo que sejam analisados os efeitos causados pelo potencial de auto energia sobre o estado fundamental do par elétron-buraco. O efeito do potencial de auto energia sobre a energia de recombinação $\Delta E_R^{e-h} = E_{R,\Sigma_{e,h}(\rho_{e,h}) \neq 0} - E_{R,\Sigma_{e,h}(\rho_{e,h}) = 0}$ é plotado na Figura 3.7(a) para o par elétron-buraco leve e na Figura 3.7(b) para o par elétron-buraco pesado com função da razão ε_r , para fios quânticos com raios $R = 4 \text{ nm}$ (\times), 6 nm (\bullet), 8 nm (Δ) e 10 nm (\star), formados por diferentes materiais. Este resultado mostra a diferença entre a energia de recombinação com efeito do potencial de auto energia ($E_{R,\Sigma_i(\rho_i) \neq 0}$) e a energia de recombinação sem efeito do potencial de auto energia ($E_{R,\Sigma_i(\rho_i) = 0}$). A análise desta diferença nos dá a vantagem de excluir o efeito do potencial de confinamento quântico devido a diferença das

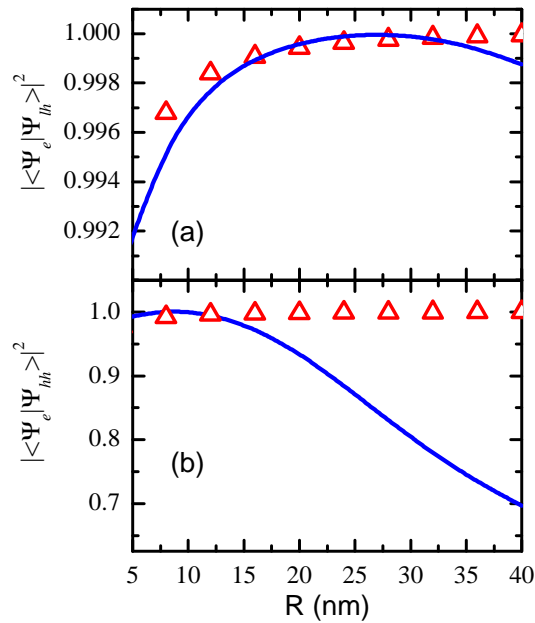


Figura 3.6: Superposição das funções de onda do (a): elétron-buraco leve (b): elétron-buraco pesado, confinado em fios GaN/HfO₂, (linhas sólidas), com efeito do potencial de auto energia e (símbolo Δ) sem efeito do potencial de auto energia.

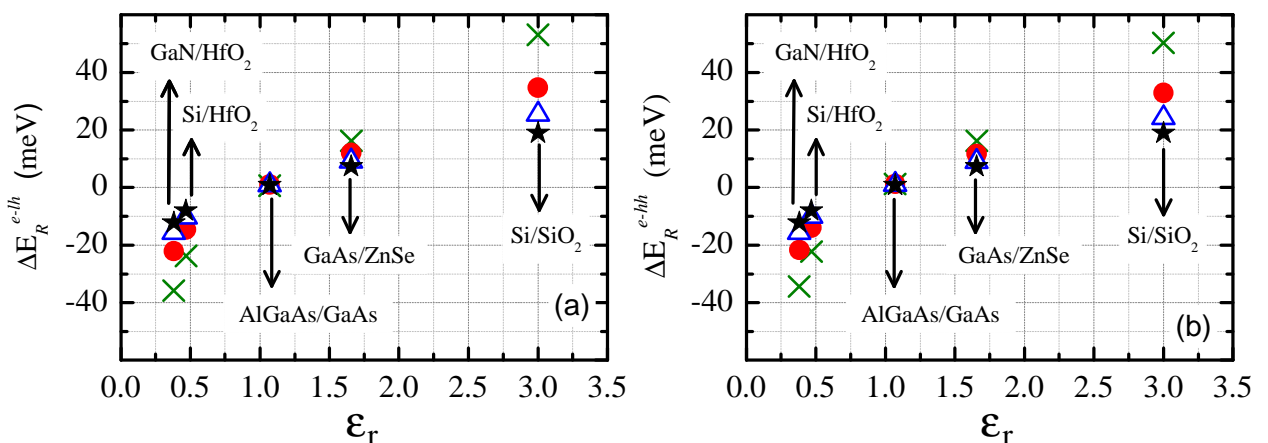


Figura 3.7: Efeito do potencial de auto energia para a energia de recombinação do par (a) elétron-buraco leve e (b) elétron-buraco pesado, para diferentes raios do fio, 4 nm (\times), 6 nm (\bullet), 8 nm (Δ) e 10 nm (\star).

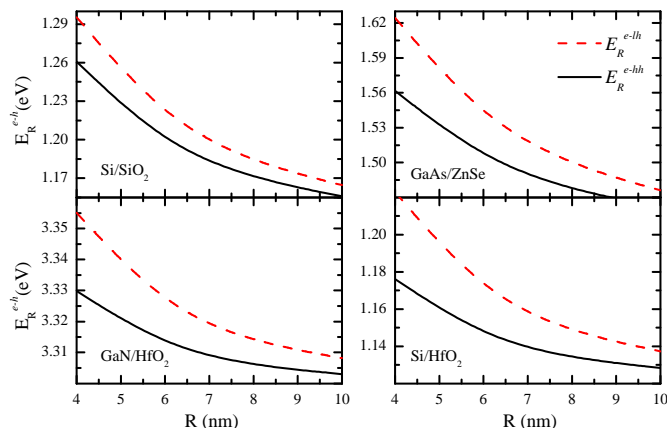


Figura 3.8: Energia de recombinação elétron-buraco pesado (linha sólida preta) e elétron-buraco leve (linha tracejada vermelha) em função do raio com fio, com efeito do potencial de auto energia $\Sigma_{e,h}$

bandas de energia $\Delta E_{e,h}$, restando apenas o confinamento devido ao potencial de auto energia $\Sigma_{e,h}$. Como descrito anteriormente, se a constante dielétrica na região do *core* for menor que a da região do *shell* ($\epsilon_r < 1$) o potencial de auto energia é atrativo e sua contribuição para a energia de recombinação é negativa $\Delta E_R < 0$. Por outro lado, quando a constante dielétrica da região do *core* é maior que a constante dielétrica da região *shell* ($\epsilon_r > 1$), o potencial de auto energia é repulsivo e sua contribuição para a energia de recombinação é positiva $\Delta E_R > 0$. Como pôde ser observado na Figura 3.7, os resultados para a energia de recombinação do par elétron-buraco leve ΔE_R^{e-lh} são iguais aos resultados da energia de recombinação do par elétron-buraco pesado ΔE_R^{e-hh} , isto ocorre porque estes resultados contém apenas o efeito do potencial de auto energia $\Sigma_{e,h}(\rho_{e,h})$, que é um potencial do tipo Coulombiano que atua apenas sobre a carga do portador. Por outro, lado plotando a energia de recombinação do par elétron-buraco E_R^{e-h} é possível observar a diferença entre a energia de recombinação do par elétron-buraco leve e par elétron-buraco pesado. Esta diferença é mostrada no gráfico da Figura 3.8.

Sistemas onde os portadores de carga são confinados em torno do *core* são conhecidos por produzir um efeito interessante quando aplicado um campo magnético perpendicularmente ao plano de confinamento. Transições do momento angular podem ocorrer, mesmo para o estado fundamental, com o aumento da intensidade do campo magnético remetendo-nos ao efeito Aharonov-Bohm (AB) [13, 56]. A Figura 3.9 plota a energia do portador em função do campo magnético no fio GaN/HfO₂ com raio $R=30\text{ nm}$. Os estados mostrados na figura correspondem à $n = 0$ e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Neste caso, as energias no estado fundamental, $n = 0, l = 0$, são menores que zero ($E_{0,0} < 0$), o que sugere o confinamento interfacial, podendo ser observadas oscilações AB para todos os portadores, embora este fato seja mais claro para o caso do *hh*, onde até as energias com momento angular $l = 3$, estão na região de $E_{0,\pm 3} < 0$. Os portadores que estão fracamente confinados na interface tem sua função de onda espalhada na região do *core*, devido ao efeito do potencial de auto energia, explicando o longo período de oscilação AB, o qual é inversamente proporcional ao raio médio do portador. Entretanto, para um raio maior

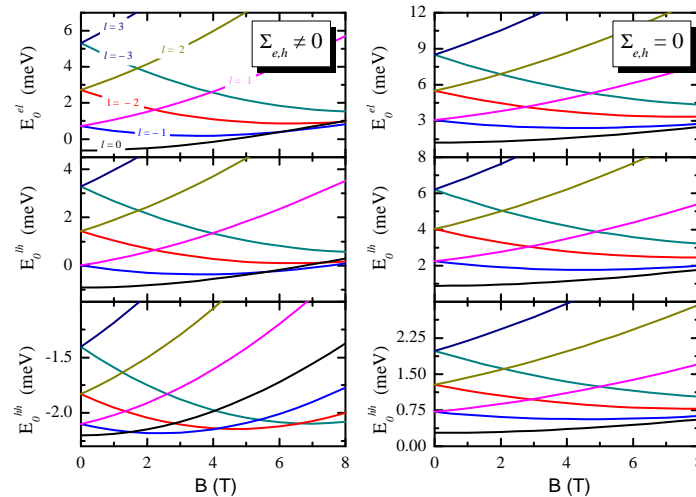


Figura 3.9: Energia dos portadores em função do campo magnético para o fio GaN/HfO₂ com raio $R = 30 \text{ nm}$, com (esquerda) e sem (direita) efeito do potencial de auto energia.

do *core*, o período de oscilação AB será reduzido, fazendo com que as transições AB realizem-se com um campo magnético de menor intensidade. Em particular, podemos notar a energia de confinamento no estado fundamental para o *hh* com o poço de largura igual a 30 nm , onde há uma troca de momento angular com o campo magnético de aproximadamente 1.5 T , enquanto que para os outros portadores existe a troca do momento angular para campos magnéticos mais intensos. Este aspecto caracteriza que o *hh* está fortemente confinado na região interfacial.

3.3 Condições físicas para o confinamento interfacial

As consequências do confinamento interfacial são inúmeras. Para algumas combinações de materiais no *core/shell*, pode-se encontrar elétrons e buracos confinados espacialmente em diferentes regiões, o que leva a redução da sobreposição das funções de onda e consequentemente da força de oscilar e taxas de recombinação. Sistema com confinamento interfacial está sujeito a transição do momento angular do estado fundamental, remetendo ao efeito AB, quando sujeito a campos magnéticos externos. Além disso, o confinamento interfacial pode apresentar efeitos importantes na mobilidade eletrônica na região *core*, ao longo do eixo \mathbf{z} . A mobilidade eletrônica depende da densidade de elétrons na região de *core*, e esta densidade é afetada pelo potencial de auto energia. Com isso é importante descrever as condições em que o confinamento interfacial ocorre. Como mencionado antes, estas condições dependem dos valores que a razão entre as constantes dielétricas ε_r , a massa efetiva do portador $m_{e,h}^{\parallel}$ e a altura do potencial de confinamento $\Delta E_{e,h}$ assumem.

A Figura 3.10(a) esboça o perfil da curva do valor esperado relativo da posição do buraco pesado em função da razão ε_r , onde $\bar{\rho} = \langle \psi_{hh} | \rho_{hh} | \psi_{hh} \rangle$. O valor esperado relativo mostra qual a posição mais provável do portador em relação a largura do poço. De acordo com as curvas

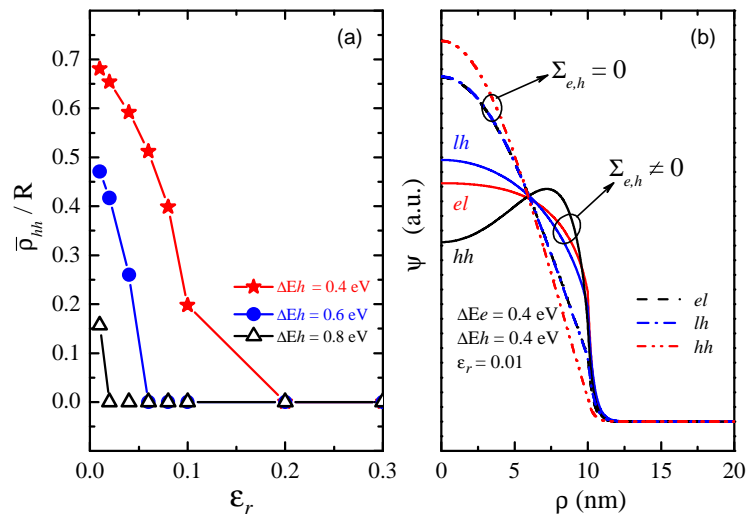


Figura 3.10: (a) Valor esperado relativo da posição do buraco pesado em função de ϵ_r , para potencial de confinamento ΔE_h igual a 0.4 eV ($-\star-$), 0.6 eV ($-\bullet-$) e 0.8 eV ($-\Delta-$). (b) Funções de ondas sem efeito de potencial de auto energia para elétron (linha tracejada), buraco leve (linha traço ponto) e buraco pesado (linha traço ponto ponto). As funções de onda com efeito do potencial de auto energia para elétron, buraco leve e buraco pesado são as linhas sólidas indicadas no gráfico. Valores obtidos para fio com raio $R = 10$ nm e Si como material na região *core*.

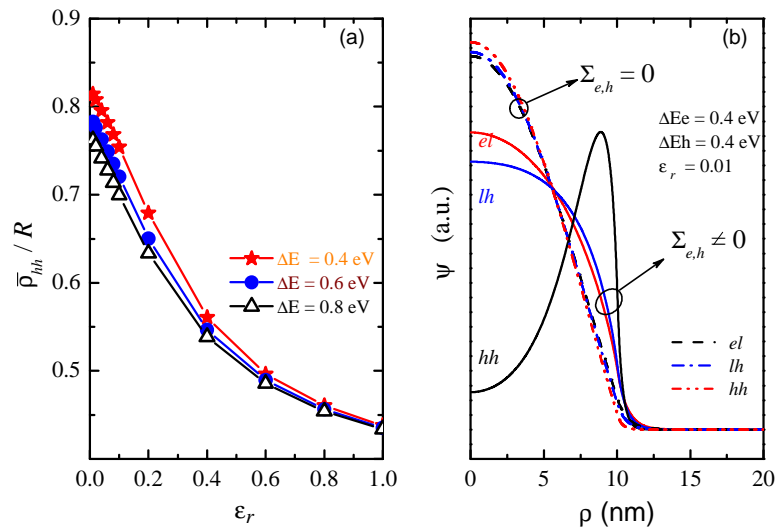


Figura 3.11: (a) Valor esperado relativo da posição do buraco pesado em função de ϵ_r , para potencial de confinamento ΔE_h igual a 0.4 eV ($-\star-$), 0.6 eV ($-\bullet-$) e 0.8 eV ($-\Delta-$). (b) Funções de ondas sem efeito de potencial de auto energia para elétron (linha tracejada), buraco leve (linha traço ponto) e buraco pesado (linha traço ponto ponto). As funções de onda com efeito do potencial de auto energia para elétron, buraco leve e buraco pesado são as linhas sólidas indicadas no gráfico. Valores obtidos para fio com raio $R = 10$ nm e GaN como material na região *core*.

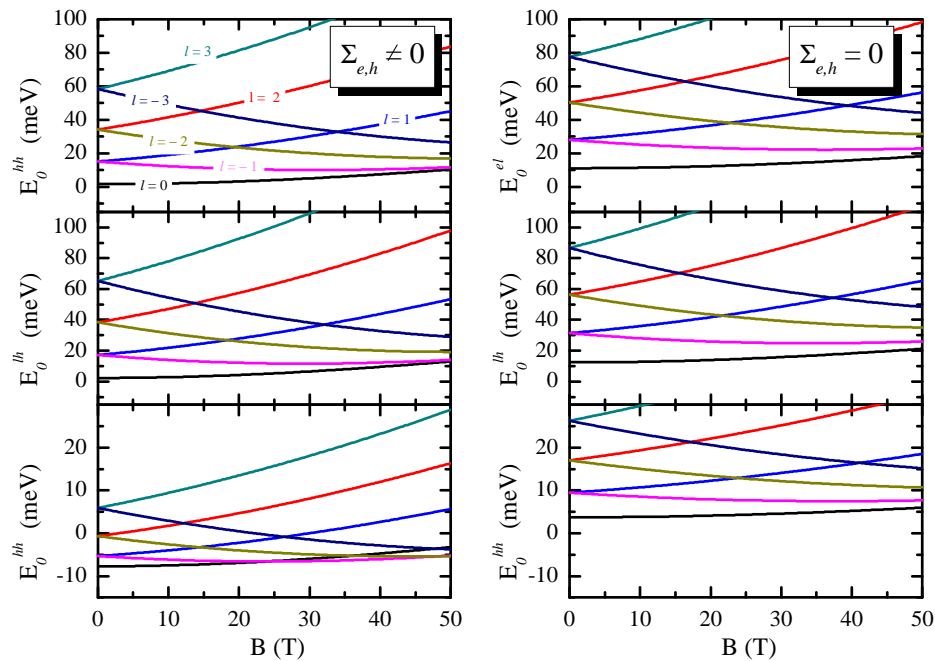


Figura 3.12: Energia do portadores em função do campo magnético do nanofio com Si na região *core*, raio $R = 10 \text{ nm}$, com (esquerda) e sem (direita) efeito do potencial de auto energia.

plotadas na Figura 3.10(a), quanto menor o potencial ΔE_h maior é a força de atração que o portador sente em direção à interface. À medida que ε_r aumenta, a atração para a região interfacial diminui. Por outro lado, o confinamento interfacial também depende da razão ε_r , que de acordo com o gráfico, quanto menor ε_r maior é a probabilidade do confinamento na interface do fio. A Figura 3.10(b) mostra que enquanto o pico da função de onda do buraco pesado está deslocado para a região interfacial, próximo de $\rho = 10 \text{ nm}$, o elétron e o buraco leve tem suas funções de ondas espalhadas, porém com maior probabilidade de estarem no centro do fio, próximo de $\rho = 0 \text{ nm}$. Este resultados foram obtidos para um fio *core-shell* tendo o Si como material do *core*. Os parâmetros utilizados na região *shell* foram escolhidos com o objetivo de mapear as condições para o confinamento interfacial. Assim, o potencial de confinamento usado é o mesmo para todos os portadores, de forma que do ponto de vista da equação de Schrödinger, a única diferença que distingue os portadores é a massa efetiva que eles possuem. Com isso, os resultados mostram que, além do valor do potencial $\Delta E_{e,h}$ e da razão ε_r , o confinamento interfacial também depende do valor da massa efetiva do portador. A Figura 3.11 mostra que o confinamento interfacial é mais evidente quando é utilizado o material GaN na região *core*.

A energia do portador é plotada na Figura 3.12 em função do campo magnético, para um nanofio com Si como material de *core*. Os parâmetros do material usado na região *shell* foram escolhidos de acordo com o resultado mostrado na Figura 3.10 para garantir que o buraco pesado esteja confinado na interface de um fio baseado em Si. O gráfico mostra a energia do portador para o estado $n = 0$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$, em fios com o efeito do potencial de auto energia e sem o efeito do potencial de auto energia. As escalas são as mesmas para os

mesmos tipos de portadores, com o intuito de mostrar a redução de energia devido o efeito do potencial de auto energia. O buraco pesado apresenta energia negativa até estados com $l = \pm 2$. O momento angular $l = 0$ apresenta primeira transição do momento angular com $B = 23$ T, segunda transição com $B = 36$ T e de terceira transição com $B = 47$ T. Diferente do que ocorre em o fios GaN/HfO₂, como mostrado na Figura 3.9, somente o buraco pesado terá energias negativas em fios baseados com Si na região do *core*.

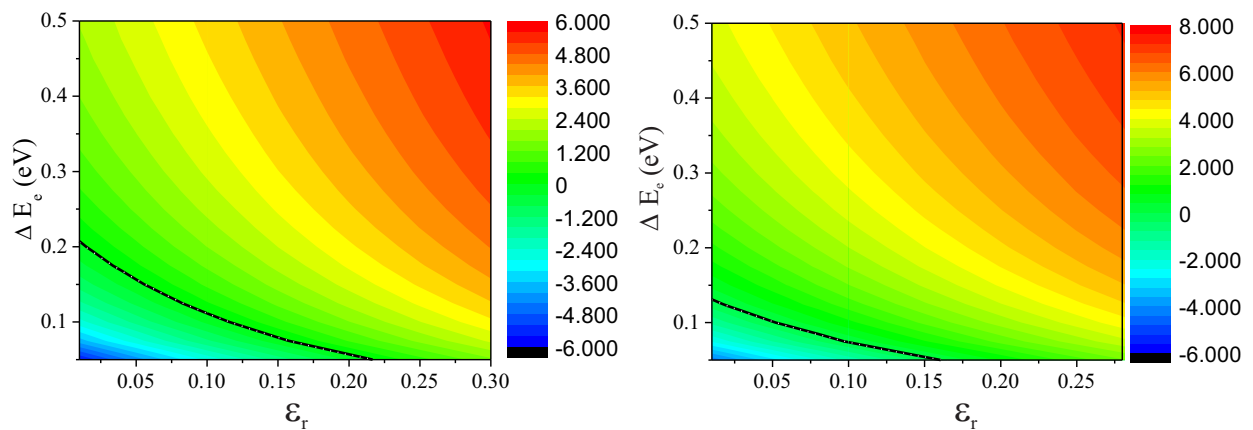


Figura 3.13: Distribuição de energia no estado fundamental do elétron (esquerda) e do buraco leve (direita), para diferentes valores de ΔE e ε_r . Fio quântico com Si na região *core*, com o raio $R = 10$ nm.

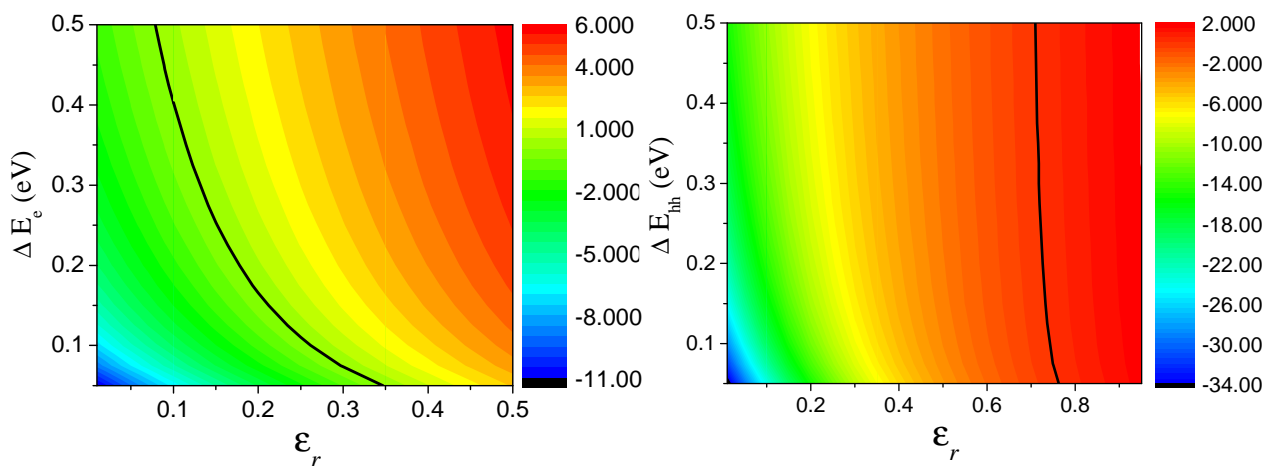


Figura 3.14: Distribuição de energia no estado fundamental do elétron (esquerda) e do buraco pesado (direita), para diferentes valores de ΔE e ε_r . Fio quântico com GaN na região *core*, com o raio $R = 10$ nm.

Os diagramas de fase mostrados nas Figuras 3.13 e 3.14, podem ser úteis para futuros trabalhos experimentais de fios *core-shell*, tendo como material de *core* o Si (Figura 3.13) ou o GaN (Figura 3.14), e diferentes materiais no *shell*, onde podemos mapear regiões de pontos

com valores do potencial e da razão da constante dielétrica ($\Delta E, \varepsilon_r$) que permitem estimar se o sistema exhibe confinamento interfacial para alguns dos portadores. O gráfico representa a distribuição de energia do estado fundamental para diferentes valores de ΔE e ε_r . A linha preta tracejada representa uma curva isoenergética igual a zero *elétron-volts* ($E_0 = 0eV$). Estados com energia abaixo da curva isoenergética sugerem que o portador esteja confinado na interface, e estados com energia acima da curva isoenergética sugerem que o portador esteja confinado no centro da região *core*.

Capítulo 4

Exciton em fios quânticos *core-shell* com efeito de potencial de carga imagem

Neste capítulo iremos calcular a energia de ligação e a energia total de excitons em fios quânticos *Core-Shell* com interfaces abruptas, formado por materias de grande interesse para indústria de dispositivos eletrônicos tais como: GaN/HfO₂, Si/HfO₂, AlGaAs/GaAs, GaAs/ZnSe e Si/SiO₂. A energia de ligação e a energia total dos excitons são calculadas levando em consideração as contribuições das cargas imagens devido as diferentes constantes dielétricas da região do *core* e *shell* ($\epsilon_r \neq 1$). O modelo teórico utilizado para o cálculo da energia de ligação e a energia do exciton baseia-se no método variacional com um parâmetro, onde utiliza-se uma função de onda conhecida que descreve o comportamento dos portadores nas regiões de interesse, considerando todas as contribuições das energias associadas com o potencial imagem, sendo consistente com a aproximação da massa efetiva e a aproximação da função envelope.

4.1 Introdução

A energia de ligação e a energia total de excitons em fios quânticos vem sendo estudados na literatura desde 1987, com o trabalho intitulado *Exciton binding energy in a quantum-well wire*, proposto por, Jerry W. Brown e Harold N. Spector e publicado na revista *Physical Review B* [74]. A partir de então, diferentes e sofisticados métodos vem sendo propostos na literatura para cálculos de excitons [75, 76, 77, 78]. Em particular, efeitos de polarização em fios quânticos, ocasionado por *mismatch* das constantes dielétricas dos materiais que constituem o fio não vem sendo abordados com a mesma frequência, apesar de ter sido recentemente demonstrado sua importância em fios com $\varepsilon_r \neq 1$ [16]. O cálculo da energia do exciton usado neste trabalho considera todas as contribuições de potencial ocasionado pelo *mismatch* das constantes dielétricas. O método teórico é baseado no cálculo das cargas imagens e leva em consideração:

1. Interação Coulombiana entre elétron e buraco (W_{dir});
2. Interação Coulombiana entre elétron e suas cargas imagens e entre buraco e suas cargas imagens (Potencial de auto energia $\Sigma_i(\rho_i)$);
3. Correlação eletrônica das posições do elétron e do buraco ao longo da direção ρ .

Um modelo ilustrativo do exciton é elucidado pela Figura 4.1, que representa um diagrama de bandas de energia em um fio quântico, com exciton confinado na região *core*. A energia total do exciton é descrita pela eq. (1.35) e a energia de ligação é calculada usando método variacional com um parâmetro, conforme descrito no capítulo 2. Nossos resultados foram obtidos para fios com $\varepsilon_r < 1$ e para fios com $\varepsilon_r > 1$ usando três aproximações:

- AP0: Chamamos de Aproximação zero, pois neste modelo não há correção devido às cargas imagens;
- AP1: Neste cálculo apenas um tipo de correção devido às cargas imagens é considerada: a interação devido ao potencial de auto energia: interação do elétron e do buraco com suas respectivas cargas imagens;
- AP2: Esta aproximação considera todas as contribuições devido às cargas imagens (potencial de auto energia, e o potencial devido a interação do elétron com as imagens do buraco e do buraco com as imagens do elétron), além da correlação eletrônica das posições do elétron e do buraco conforme mostrado na Figura 4.2.

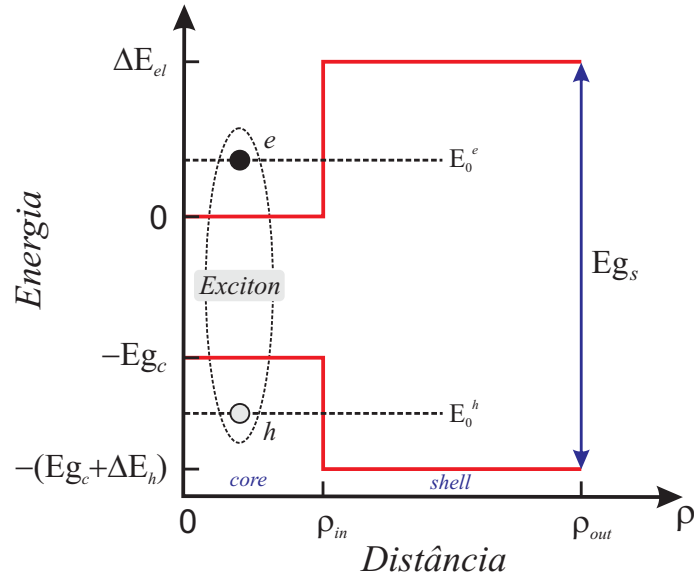


Figura 4.1: - Representação esquemática de exciton no diagrama de bandas de energia em um fio quântico com exciton confinado na região do *core*.

4.2 Potenciais de interação devido as cargas imagens

No capítulo 2 foi descrito pela eq. (2.25) o Hamiltoniano relacionado com a energia de ligação do exciton:

$$\mathcal{H}_{e-h}(\rho_e, \rho_h, \theta, z) = -\frac{\hbar^2}{2\mu^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + W_{dir}(\rho_e - \rho_h) + W_{ind}(\rho_e - \rho_h),$$

onde o segundo termo está relacionado com a interação direta W_{dir} de elétron e buraco e foi descrito em detalhes na eq. 2.45. O último termo W_{ind} está relacionado com a aproximação AP2. As quatro possíveis correlações eletrônicas das posições do elétron e do buraco, mostradas na Figura 4.2, definem um potencial W_{ind} que será descrito de acordo com as posições, sendo CC quando elétron e buraco encontram-se na região do *core*, SS ambos na posição *shell*, CS elétron no *core* e buraco no *shell*, SC elétron na *Shell* e buraco no *core*:

$$W_{ind}^{CC}(\rho_e, \rho_h) = -\frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_1} (\epsilon_r - 1) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk C_m(kR, \epsilon_r) \times \cos[k(z_e - z_h)] \cos[m(\theta_e - \theta_h)] I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \quad (4.1)$$

$$W_{ind}^{SS}(\rho_e, \rho_h) = -\frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_2} (\epsilon_r - 1) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m(kR, \epsilon_r) \times \cos[k(z_e - z_h)] \cos[m(\theta_e - \theta_h)] K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) \quad (4.2)$$

$$W_{ind}^{CS}(\rho_e, \rho_h) = - \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} (\varepsilon_r - 1) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk \{ \varepsilon_1 D_m(kR, \varepsilon_r) \right. \\ \left. \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) + \varepsilon_2 C_m(kR, \varepsilon_r) I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \} \right] \quad (4.3)$$

$$W_{ind}^{SC}(\rho_e, \rho_h) = - \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} (\varepsilon_r - 1) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk \{ \varepsilon_1 D_m(kR, \varepsilon_r) \right. \\ \left. \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) + \varepsilon_2 C_m(kR, \varepsilon_r) I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \} \right] \quad (4.4)$$

As correções para a aproximação AP2 (W_{ind}), é um conjunto de equações de Bessel modificadas de primeiro e segundo tipo.

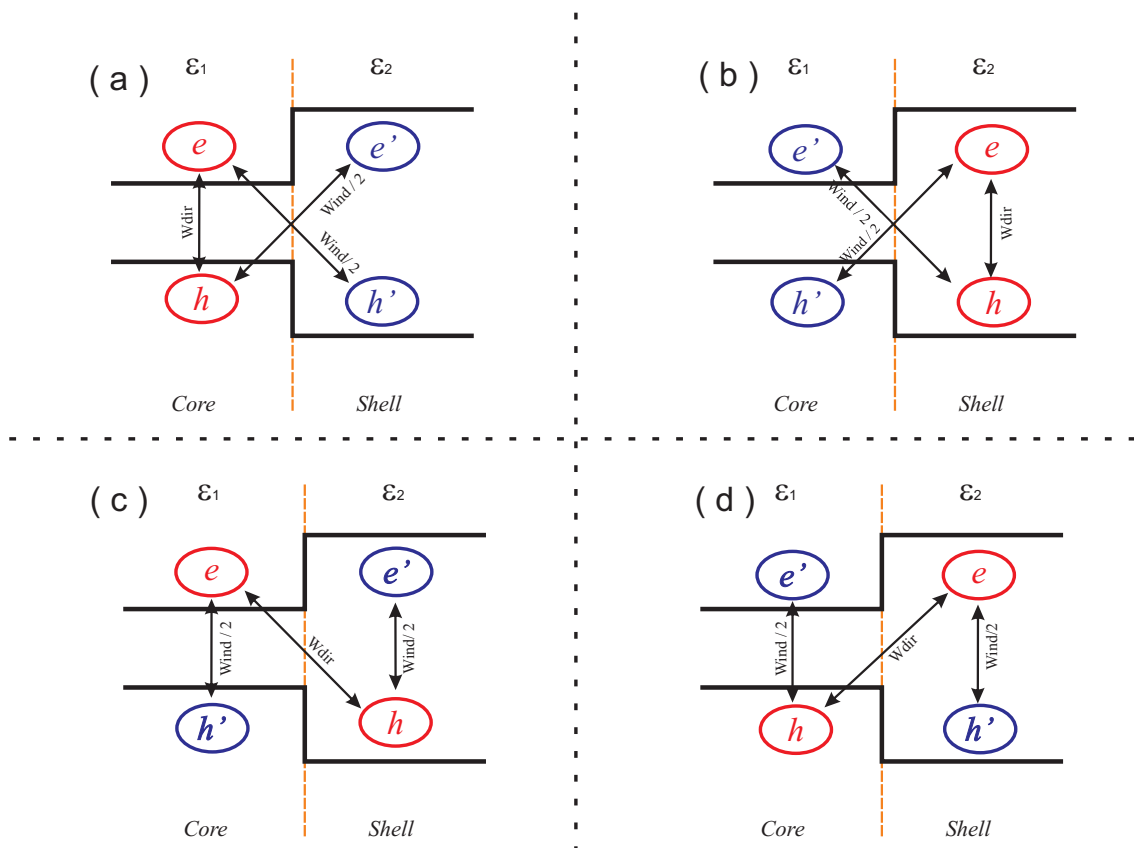


Figura 4.2: Representação gráfica das possíveis localizações dos portadores no fio quântico (a) - Elétron e buraco no *Core*, suas imagens no *Shell*, (b) Elétron e buraco no *Shell* e suas imagens no *Core*, (c) Elétrons no *Core* suas imagens no *Shell*, buraco no *Shell* e suas no *Core* e (d) Elétron no *Shell* suas imagens no *Core* e buraco no *Core* e suas imagens no *Shell*.

4.3 Resultados

A energia de ligação do exciton é obtida por meio do cálculo numérico da eq. (2.52),

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}^+ \tau^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon(\rho)\epsilon_0\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} e^{-\frac{a}{2}} K_0\left(\frac{a}{2}\right) d\theta +$$

$$\frac{1}{\tau} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W_{ind} |\varphi_e|^2 |\varphi_h|^2 e^{-2\left(\frac{z}{\tau}\right)^2} \rho_e \rho_h d\rho_e d\rho_h d\theta dz = E_b,$$

onde o último termo da primeira parcela representa a aproximação AP2, a qual depende de $\epsilon_r \neq 1$ em W_{ind} descrito nas eq. (4.1) à eq. (4.4). A aproximação AP1 negligência o último termo da primeira parcela e difere da aproximação AP0 pelo fato das funções de onda φ_e e φ_h , no segundo termo da primeira parcela, serem modificadas pelos potenciais de auto energia Σ_e e Σ_h , respectivamente.

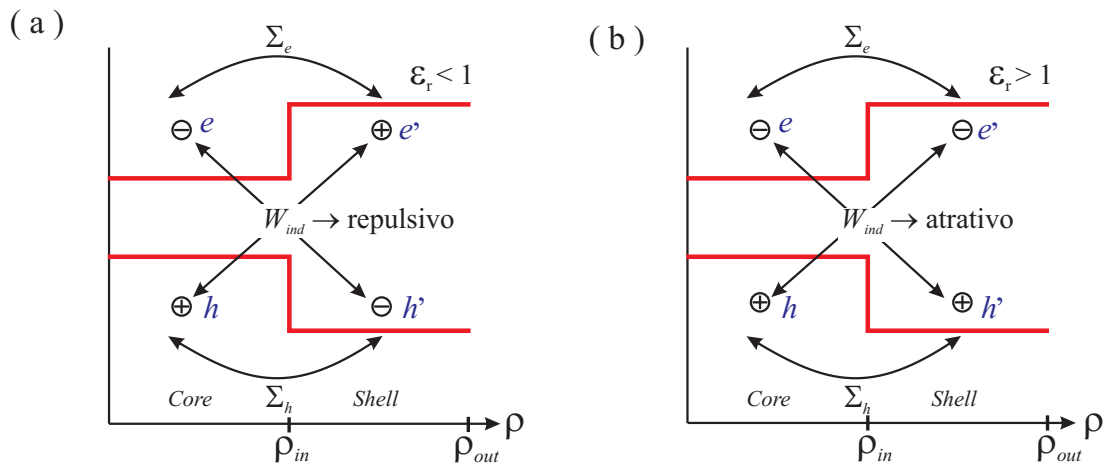


Figura 4.3: Diagrama esquemático das interações entre os portadores e as cargas imagens quando (a) $\epsilon_r < 1$ e (b) $\epsilon_r > 1$.

A Figura 4.3 (a) mostra que em sistemas com $\epsilon_r < 1$ o potencial W_{ind} é repulsivo, o que pode ser observado nas eq. (4.1) à eq. (4.4), que resultam em $W_{ind} > 0$. Como consequência, a aproximação AP2 diminui a energia de ligação E_b em comparação com a aproximação AP0. O potencial que o elétron e o buraco sentem devido as suas respectivas auto energias, Σ_e e Σ_h , é atrativo, pelo fato destes portadores se encontrarem na região de menor constante dielétrica. Isto produz um espalhamento da função destes portadores, e em alguns casos confinamento interfacial, conforme observado na Figura 3.5. Como consequência a aproximação AP1 diminui a energia de ligação em comparação com a aproximação AP0. Em comparação com AP1, a aproximação AP2 introduz um potencial repulsivo na eq. (2.52), diminuindo energia de ligação. Estas observações podem ser vistas na Tabela 4.1, que compara valores para a energia de ligação E_b em fios quânticos *core-shell* estreitos ($R = 4$ nm) e largos ($R = 18$ nm), com as três aproximações.

Tabela 4.1: Comparação da energia de ligação de excitons $el-hh$ e $el-hh$, com diferentes aproximações, para fios estreitos $R = 4 \text{ nm}$ e fios largos $R = 18 \text{ nm}$.

Energia de ligação de exciton em meV		$R = 4 \text{ nm}$			$R = 18 \text{ nm}$		
ϵ_r		AP0	AP1	AP2	AP0	AP1	AP2
Elétron - Buraco leve							
GaN/HfO ₂	0.3800	9.158	8.86881	8.57936	3.3439	3.07105	2.80265
Si/HfO ₂	0.4680	9.50949	9.3655	9.12372	3.43108	3.30694	3.08274
Al _{0.3} Ga _{0.7} As/GaAs	1.0705	10.7452	10.815	10.9462	7.27363	7.28855	7.31744
GaAs/ZnSe	1.5949	22.1393	22.1739	22.3638	8.48284	8.5962	8.86378
Si/SiO ₂	3.000	49.5385	50.2812	51.1766	16.0285	16.8656	17.6815
Elétron - Buraco Pesado							
GaN/HfO ₂	0.3800	10.9062	10.3989	10.1094	3.74233	3.023	2.7546
Si/HfO ₂	0.4680	12.4623	12.1813	11.9395	4.07899	3.77729	3.55309
Al _{0.3} Ga _{0.7} As/GaAs	1.0705	12.6935	12.878	12.9092	7.23682	7.27133	7.30021
GaAs/ZnSe	1.5949	21.5328	21.538	21.8278	8.2358	8.44683	8.71441
Si/SiO ₂	3.000	57.6757	58.9243	59.8198	18.2874	19.88	20.6958

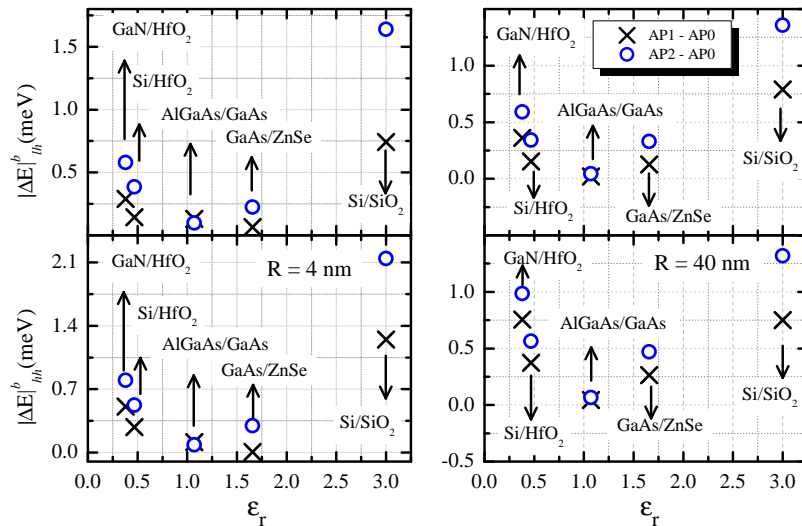


Figura 4.4: Diferença entre as aproximações AP1 e AP2 em relação a aproximação AP0 para o valor absoluto da energia de ligação $el-hh$ e $el-hh$, em função da razão ϵ_r , para nanofios com $R = 4 \text{ nm}$ (lado esquerdo) e com $R = 40 \text{ nm}$ (lado direito).

Em sistemas com $\varepsilon_r > 1$, como mostrado na Figura 4.3 (b) o potencial W_{ind} é atrativo, resultando em $W_{ind} < 0$ nas eq. (4.1) à eq. (4.4). Neste caso a aproximação AP2 aumenta a energia de ligação E_b em comparação com a aproximação AP0. O potencial que o elétron e o buraco sentem devido às suas respectivas auto energias, Σ_e e Σ_h , é repulsivo, pelo fato destes portadores se encontrarem na região de maior constante dielétrica. Assim, a função de onda do portador estará mais compelida a se localizar em torno da região central do fio quântico. Isto resulta que a aproximação AP1 aumenta a energia de ligação se comparada com a aproximação AP0. Em comparação com AP1, a aproximação AP2 introduz um potencial atrativo na eq. (2.52), aumentando a energia de ligação. Estas observações também podem ser vistas na Tabela 4.1.

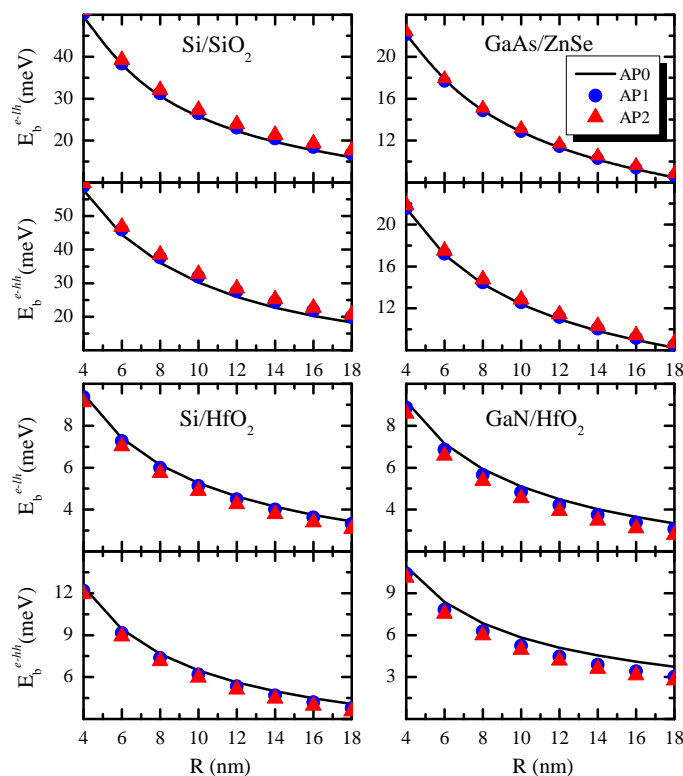


Figura 4.5: Energia de ligação em função do raio do fio para diferentes materiais, calculada com as aproximações **APO** (Linha sólida preta), AP1 (\bullet) e AP2 (Δ).

A Figura 4.4 ilustra a diferença entre as aproximações AP1 e AP2 em relação a aproximação AP0 para o valor absoluto da energia de ligação $el-lh$ e $el-hh$, em função da razão ε_r , para nanofios com $R = 4nm$ (lado esquerdo) e com $R = 40nm$ (lado direito). Este resultado expressa a contribuição do potencial de auto energia (\times) e a contribuição combinada do potencial da auto energia com o potencial W_{ind} (\circ) para a energia de ligação de $el-lh$ e $el-hh$ em fios quânticos formados por diferentes materiais. Pode-se observar que quanto maior a diferença da razão ε_r em relação a 1, maior serão as contribuições das aproximações AP1 e AP2.

Com o aumento do raio do fio, a energia de ligação da heteroestrutura tende para o valor da energia de ligação no *bulk*. No caso dos efeitos produzidos pelas cargas imagens, quando a

heteroestrutura tende para o *bulk* (raio muito grande), o efeito dos potenciais $\Sigma_{e,h}$ e W_{ind} tende a zero. Este resultado pode ser observado na Figura 4.5, que mostra o valor da energia de ligação em função do raio, para os fios quânticos GaAs/ZnSe, GaN/HfO₂, Si/HfO₂ e Si/SiO₂. Em termos energéticos em GaN/HfO₂ com $R = 4$ nm a aproximação AP2 produz uma correção absoluta de 0.3 meV em relação à AP1. Esta correção diminui para 0.25 meV para o raio $R = 18$ nm. Em fios Si/SiO₂ a correção é de 0.9 meV com $R = 4$ nm e de 0.8 meV com $R = 18$ nm.

A ordem de grandeza da energia de ligação apresentada neste trabalho é 3 vezes menor que a ordem de grandeza da energia total do exciton, os resultados da energia de ligação são plotados em meV, enquanto que os resultados para a energia total de exciton, mostrado na Tabela 4.2, são expostos em eV. Esta diferença na ordem de grandeza ocorre porque a energia total do exciton depende do gap do material da região *core*.

$$E_{exc} = E_{gap} + E_e + E_h - |E_b|,$$

onde, conforme discutido antes, a energia E_b é a energia mínima para manter o par elétron-buraco ligado, e o sinal negativo no seu valor absoluto garante que esta energia é perdida pelo par. Então, enquanto os valores do gap, da energia do elétron e energia do buraco aumentam a energia do exciton, a energia de ligação diminui o seu valor. A energia do exciton calculada utilizando a aproximação AP1 leva em consideração o efeito do potencial de auto energia $\Sigma_{e,h}$, que altera a energia dos portadores e a energia de ligação por meio da função de onda que é espalhada ($\varepsilon_r < 1$) ou compelida para a região central do fio ($\varepsilon_r > 1$). A aproximação AP2, para o cálculo da energia total do exciton, apenas acrescenta o efeito do potencial W_{ind} , o qual expressa a interação do elétron com as imagens do buraco e do buraco com as imagens do elétron.

Em sistemas onde $\varepsilon_r < 1$, a energia do portador diminui com a aproximação AP1, podendo ocorrer confinamento interfacial com energia negativa, como por exemplo, em fios GaN/HfO₂ com raio de 18 nm. Este efeito produz uma energia total de exciton menor que a energia do gap do material na região *core*, como pode ser observado na Tabela 4.2. O caráter repulsivo do potencial W_{ind} usado na aproximação AP2 aumenta a energia do exciton em relação a aproximação AP1, embora esta diferença seja muito pequena, da ordem de décimos meV. Em casos onde o sistema possui $\varepsilon_r > 1$, o potencial de auto energia da aproximação AP1 é repulsivo fazendo com que a energia do portador aumente, conseqüentemente, aumentando a energia do exciton em relação a aproximação AP0. Por outro lado, o caráter atrativo do potencial W_{ind} , aproximação AP2, produz um aumento no valor absoluto da energia de ligação e um decréscimo na energia total de exciton em relação a aproximação AP1, Tabela 4.2. A Figura 4.6 mostra a dependência da energia total do exciton com o raio do fio para diferentes materiais com $\varepsilon_r < 1$ e $\varepsilon_r > 1$.

Em geral a energia de ligação de exciton em fios quânticos é da ordem de algumas unidades de meV [37, 59] devido ao confinamento cilíndrico da heteroestrutura, com isso, a energia de ligação calculada por métodos variacionais apresenta aproximações com melhores precisões quando comparadas com outros métodos, como exemplo o método do potencial efetivo que superestima o valor da energia de ligação [43].

Tabela 4.2: Comparação da energia total de excitons $el-lh$ e $el-hh$, com diferentes aproximações, para fios estreitos $R = 4 \text{ nm}$ e fios largos $R = 18 \text{ nm}$.

Energia total de exciton em eV	ϵ_r	$R = 4 \text{ nm}$			$R = 18 \text{ nm}$		
		AP0	AP1	AP2	AP0	AP1	AP2
Elétron - Buraco leve							
GaN/HfO ₂	0.3800	3.37841	3.34288	3.34317	3.30227	3.29623	3.29650
Si/HfO ₂	0.4680	1.23592	1.21233	1.21257	1.12450	1.12050	1.12073
Al _{0.3} Ga _{0.7} As/GaAs	1.0705	1.50360	1.50435	1.50432	1.43049	1.43094	1.43091
GaAs/ZnSe	1.5949	1.58449	1.60083	1.60054	1.43142	1.43511	1.43484
Si/SiO ₂	3.0000	1.19164	1.24396	1.24307	1.11179	1.12113	1.12031
Elétron - Buraco Pesado							
GaN/HfO ₂	0.3800	3.35002	3.31607	3.31636	3.30025	3.29422	3.29449
Si/HfO ₂	0.4680	1.18478	1.16280	1.16304	1.12075	1.11691	1.11714
Al _{0.3} Ga _{0.7} As/GaAs	1.0705	1.48363	1.48501	1.48498	1.42668	1.42710	1.42707
GaAs/ZnSe	1.5949	1.52237	1.53861	1.53832	1.42672	1.43023	1.42996
Si/SiO ₂	3.0000	1.15155	1.20059	1.19970	1.10673	1.11500	1.11419

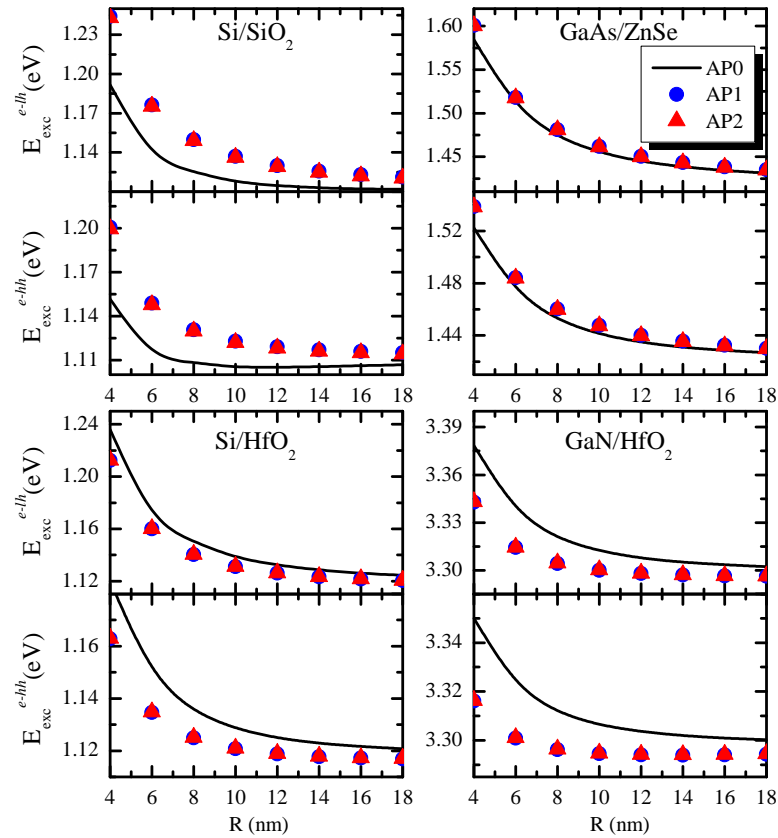


Figura 4.6: Energia de exciton para os nanofios de GaAs/ZnSe, GaN/HfO₂, Si/HfO₂ e Si/SiO₂ para os potenciais AP0 (Δ), AP1 (\bullet) e AP2 (Linha preta sólida).

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Pesquisas atuais, tanto no campo teórico quanto experimental, têm buscado o crescimento de novos materiais em dispositivos de modo que atendam as exigências do mercado tecnológico. SiO₂ é o material mais utilizados como porta óxida, embora apresente limitações devido a elevada corrente de tunelamento quando são crescidos com espessuras menores de 1.0 nm [72, 73]. Este fato submete a indústria de tecnologia de semicondutores a se adequarem utilizando novas técnicas de modo que continue consolidada neste mercado. Cálculos teóricos das estruturas eletrônicas são realizados com aproximações bem definidos na literatura.

Nesta dissertação foi estudado o confinamento de portadores em fios quânticos *core-shell* formados por materiais de grande importância para a indústria eletrônica: AlGaAs/GaAs, GaAs/ZnSe, GaN/HfO₂, Si/HfO₂ e Si/SiO₂. O foco do trabalho foi investigar propriedades eletrônicas de portadores confinados nestes sistemas, com ênfase nos efeitos ocasionados pelo descasamento das constantes dielétricas nas interfaces destas heteroestruturas. O método utilizado para estudar o efeito ocasionado pelo descasamento das constantes dielétricas é baseado no método das cargas imagens.

Os resultados mostraram que os efeitos do potencial de auto energia, devido as cargas imagem, modificam fortemente a estrutura eletrônica. A propriedade atrativa do potencial, em sistemas com $\varepsilon_r = \varepsilon_1/\varepsilon_2 < 1$, gera cúspides na região da interface do potencial de confinamento de portadores. Em alguns casos estas cúspides têm profundidade suficiente para atrair portadores para as regiões interfaciais. O confinamento interfacial depende basicamente das grandezas (i) massa efetiva m_i^{\parallel} , (ii) profundidade do potencial devido ao não alinhamento das bandas de energia $\Delta E_i(\rho_i)$ e (iii) razão entre as constantes dielétricas ε_r . O fato do portador estar confinado na região interfacial afeta a eficiência das transições ópticas. Propriedades ópticas e eletrônicas destes sistemas foram calculadas levando em consideração regimes de confinamentos em fios com raios estreitos e fios com raios largos. Os resultados indicam que para ligas onde $\varepsilon_r < 1$, não é viável negligenciar os efeitos do potencial de auto energia. Em sistemas onde $\varepsilon_r > 1$ o potencial de auto energia apenas suaviza o perfil do potencial na região de interface. Como o potencial causado pela auto energia é repulsivo, os portadores ficam mais confinados na região central do fio quântico aumentando a energia dos portadores. O efeito provocado pelo potencial de auto energia sobre as propriedades eletrônicas dos portadores é de natureza quantitativa, diferente do que ocorre em alguns casos com $\varepsilon_r < 1$, onde os modelos usuais para

o cálculo de energia de portadores em fios quânticos não se aplicam.

Os cálculos da energia de ligação foram realizados usando três aproximações, AP0 que não considera efeitos causado pelas cargas imagens; AP1 que considera o potencial de auto energia causada pelo portador, interação do portador com suas cargas imagem; AP2 que considera todas as contribuições de potenciais devido as cargas imagens. Devido ao confinamento cilíndrico, a energia de ligação em fios quânticos é da ordem de algumas dezenas de meV , e efeitos devido as cargas imagem não tem influência qualitativa na energia de ligação e energia total de excitons, produzindo efeitos apenas quantitativos da ordem de algumas unidades de meV .

A maioria dos materiais utilizados na indústria tem $\varepsilon_r > 1$, e em modelos teóricos que descrevem as propriedades eletrônicas destes materiais, em geral, negligenciam as contribuições devido à cargas imagens. Porém, recentemente heteroestruturas do tipo Si/HfO₂, Si/SrTiO₃, GaN/HfO₂ entre outras, com $\varepsilon_r < 1$, têm sido utilizadas para a fabricação de dispositivos eletrônicos, e efeitos de potencial imagem torna-se importante em modelos teóricos.

Como perspectivas futuras, o tema abordado na presente dissertação tem fôlego para dar origem a três novos trabalhos:

1. Cálculo das propriedades eletrônicas (densidade de estados, bandas de energias) da impureza por meios de métodos auto consistentes das soluções das equações de Schrödinger e Poisson;
2. Cálculo da corrente de tunelamento em fio quântico *core-multishell*;
3. Estudo de mobilidade eletrônica dos portadores ao longo do eixo z .

Apêndice A

A.1 Potencial de Auto Energia

Os potenciais que descrevem o efeito imagem no confinamento de portadores em fios quânticos são solução da equação de Poisson. Estes cálculos são necessários devido as constantes dielétricas terem valores diferentes. Assim, a equação de Poisson apropriada para este problema é:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 \nabla^2 V(r, r') &= -e\delta(r - r') & \text{para } |\rho| < R \\ \varepsilon_2 \nabla^2 V(r, r') &= 0 & \text{para } |\rho| > R \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

onde a solução para a equação de Poisson para cada região é dado por:

Para cargas localizadas na região do core os potenciais são dados por:

- 1º caso: potencial no core (V_{in})
- 2º caso: potencial no shell (V_{out})

Para $\rho \leq R$ o potencial é dado por (1º caso):

$$\begin{aligned} V_{in}(r, r') &= \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde $C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right)$ é dado por:

$$C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) = \frac{K_m(kR) K'_m(kR)}{I_m(kR) K'_m(kR) - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} I'_m(kR) K_m(kR)} \quad (\text{A.3})$$

Para $\rho > R$ o potencial é dado por (2º caso):

$$\begin{aligned} V_{out}(r, r') &= \frac{2e}{4\pi^2\varepsilon_1} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] \\ &\quad \times \left[\frac{\left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) I_m(kR) K'_m(kR)}{I_m(kR) K'_m(kR) - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} I'_m(kR) K_m(kR)} + 1 \right] [I_m(k\rho') k_m(k\rho)] \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Estes potenciais acima obtidos são válidos para quando a carga estiver localizada na região anterior à interface ($\rho \leq R$). Para a carga localizada na outra região ($\rho > R$), resolve-se a equação de Poisson onde agora:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 \nabla^2 V_{in}(r, r') &= 0 && \text{para } |\rho| < R \\ \varepsilon_2 \nabla^2 V_{out}(r, r') &= -e\delta(r - r') && \text{para } |\rho| > R \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

E a solução para a equação de Poisson para a carga localizada na segunda região ($\rho > R$) é dada por:

- 3º caso: potencial no core (V_{in})
- 4º caso: potencial no shell (V_{out})

Para $\rho \leq R$, o potencial é dado por (3º caso):

$$\begin{aligned} V_{in}(r, r') &= \frac{2e}{4\pi^2 \varepsilon_2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \int_0^\infty dk \cos[k(z-z')] \\ &\times \left[\frac{\left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1\right) I'_m(kR) K_m(kR)}{I_m(kR) K'_m(kR) - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} I'_m(kR) K_m(kR)} + 1 \right] K_m(k\rho') K_m(k\rho) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Para $\rho > R$, o potencial é dado por (4º caso):

$$\begin{aligned} V_{out}(r, r') &= \frac{e}{4\pi \varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1\right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \right. \\ &\times \left. \int_0^\infty dk \cos[k(z-z')] D_m\left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

onde $D_m\left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\right)$ é dado por:

$$D_m\left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\right) = \frac{I_m(kR) I'_m(kR)}{I_m(kR) K'_m(kR) - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} I'_m(kR) K_m(kR)} \quad (\text{A.8})$$

onde $I_m(kR)$ e $K_m(kR)$ ($I'_m(kR)$ e $K'_m(kR)$) são as funções modificadas de Bessel de primeiro e segundo tipo, respectivamente (derivadas das funções modificadas de Bessel de primeiro e segundo tipo, respectivamente).

Após descrever todos os potenciais possíveis para a cargas nas duas regiões do fio quântico, a próxima etapa é calcular o potencial de auto-energia $W(r_e, r_h)$ com os portadores localizados nas regiões:

Para o primeiro caso temos os portadores na região do *core*, ilustrado na Figura A.1:

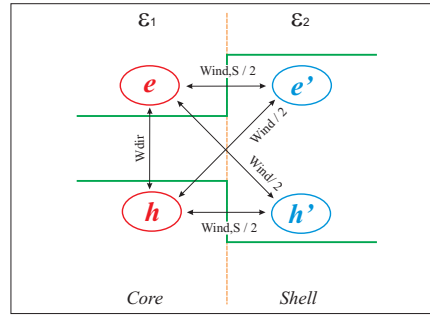


Figura A.1: - Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron e o buraco estão na região do *core* e suas imagens na região do *shell*.

$$W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \int dre [\delta(r - r_e) - \delta(r - r_h)] [V_{in}(r, r_e) - V_{in}(r, r_h)]. \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \left\{ \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_e) + \right. \\ \left. - \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_h) + \right. \\ \left. - \int dre \delta(r - r_h) V_{in}(r, r_e) + \right. \\ \left. - \int dre \delta(r - r_h) V_{in}(r, r_h) \right\}. \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

Resolvendo a primeira integral, teremos:

$$I = \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_e) \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} I = \int dre \delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\epsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I = \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_1 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \right. \\ \left. \times I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_e) \right] \quad (\text{A.13}) \end{aligned}$$

de modo que:

$$I = \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_1 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \right]$$

$$\times \left[\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_e) \right] \quad (\text{A.14})$$

Resolvendo a segunda integral, teremos:

$$II = \int dr e\delta(r - r_e) V_{in}(r, r_h) \quad (\text{A.15})$$

$$II = \int dr e\delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.16})$$

Assim:

$$II = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \\ \times \cos[k(z - z_e)] \cos[m(\theta - \theta_e)] I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \quad (\text{A.17})$$

Foi omitido termo $isen[m(\theta - \theta')]$ pelo fato de pertencer ao conjunto dos números complexos, e não ser relevante no problema em questão.

Resolvendo a terceira integral teremos:

$$III = \int dr e\delta(r - r_h) V_{in}(r, r_e) \quad (\text{A.18})$$

$$III = \int dr e\delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.19})$$

Assim:

$$III = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \\ \times \cos[k(z - z_h)] \cos[m(\theta - \theta_h)] I_m(k\rho_h) I_m(k\rho_e) \quad (\text{A.20})$$

E por final resolvendo IV teremos:

$$IV = \int dr e\delta(r - r_h) V_{in}(r, r_h) \quad (\text{A.21})$$

$$IV = \int dr e\delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right]$$

$$\times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \quad (A.22)$$

$$IV = \left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right. \\ \left. \times I_m(k\rho_h) I_m(k\rho_h) \right] \quad (A.23)$$

de modo que:

$$IV = \left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \right. \\ \left. \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m^2(k\rho_h) \right] \quad (A.24)$$

Assim, temos que:

$$W(r_e - r_h) = \frac{1}{2} [(I + IV) - (II + III)] \quad (A.25)$$

Tomando a variação de W, teremos:

$$\delta W(r_e - r_h) = W_{dir}(r_e, r_h) + \Sigma_{e,h}(r_e, r_h) + W_{ind}(r_e, r_h) \quad (A.26)$$

onde $W_{dir}(r_e, r_h)$ é o potencial de interação Coulombiano direto entre os portadores (elétrons e buracos) que é descrito matematicamente por:

$$W_{dir}(r_e, r_h) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1} \frac{1}{|r_e - r_h|} \quad (A.27)$$

Já o potencial de interação entre os portadores e suas próprias imagens é dado por (e x e' / h x h'):

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{1}{2} [I + IV] \quad (A.28)$$

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \\ [I_m^2(k\rho_e) + I_m^2(k\rho_h)] \quad (A.29)$$

No caso do potencial de interação entre os portadores e as imagens trocadas (e x h' / h x e') é dado por:

$$W_{ind}(r_e, r_h) = -\frac{1}{2} [II + III] \quad (A.30)$$

$$W_{ind}(r_e, r_h) = -\frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \\ \times \cos [k(z_e - z_h)] \cos [m(\theta_e - \theta_h)] I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \quad (A.31)$$

Para o segundo caso onde os portadores se encontram na região do shell como mostrado na Figura A.2:

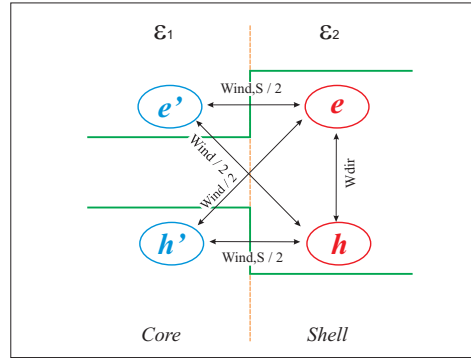


Figura A.2: - Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron e o buraco estão na região do *shell*, e suas imagens na região do *core*.

$$W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \int dr e [\delta(r - r_e) - \delta(r - r_h)] [V_{out}(r, r_e) - V_{out}(r, r_h)]. \quad (A.32)$$

$$\begin{aligned} W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \left\{ \int dr e \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_e) + \right. \\ \left. - \int dr e \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_h) + \right. \\ \left. - \int dr e \delta(r - r_h) V_{out}(r, r_e) + \right. \\ \left. + \int dr e \delta(r - r_h) V_{out}(r, r_h) \right\}. \quad (A.33) \end{aligned}$$

Resolvendo a Primeira integral, teremos:

$$I = \int dr e \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_e) \quad (A.34)$$

$$\begin{aligned} I = \int dr e \delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\epsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (A.35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_2 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \\ \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_e) \quad (A.36) \end{aligned}$$

Assim:

$$I = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_e) \quad (\text{A.37})$$

Resolvendo para a segunda integral, teremos:

$$II = \int dre\delta(r - r_e) V_{out}(r, r_h) \quad (\text{A.38})$$

$$II = \int dre\delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.39})$$

Assim:

$$II = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times \cos[k(z - z_e)] \cos[m(\theta - \theta_e)] K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) \quad (\text{A.40})$$

Analogamente, nas integrais anteriores foi omitido o termo $isen[m(\theta - \theta')]$ pelo fato de pertencer ao conjunto dos números complexos, e não ser relevante no problema em questão.

Resolvendo a terceira integral, teremos:

$$III = \int dre\delta(r - r_h) V_{out}(r, r_e) \quad (\text{A.41})$$

$$III = \int dre\delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.42})$$

Assim:

$$III = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times \cos[k(z - z_h)] \cos[m(\theta - \theta_h)] K_m(k\rho_h) K_m(k\rho_e) \quad (\text{A.43})$$

E por final resolvendo IV, teremos:

$$IV = \int dre\delta(r - r_h) V_{out}(r, r_h) \quad (\text{A.44})$$

$$IV = \int dre \delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\epsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^\infty dk \cos[k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (A.45)$$

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \\ \times K_m(k\rho_h) K_m(k\rho_h) \quad (A.46)$$

de modo que:

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_h) \quad (A.47)$$

Assim, temos que:

$$W(r_e - r_h) = \frac{1}{2} [(I + IV) - (II + III)] \quad (A.48)$$

Tomando a variação de W, teremos:

$$\delta W(r_e - r_h) = W_{dir}(r_e, r_h) + \Sigma_{e,h}(r_e, r_h) + W_{ind}(r_e, r_h) \quad (A.49)$$

onde $W_{dir}(r_e, r_h)$ é o potencial de interação Coulombiano direto entre os portadores (elétrons e buracos) que é descrito por:

$$W_{dir}(r_e, r_h) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_2 |r_e - r_h|} \quad (A.50)$$

Já o potencial de interação entre os portadores e suas próprias imagens é dado por (e x e' / h x h'):

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{1}{2} [I + IV] \quad (A.51)$$

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{e^2}{4\pi^2\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \\ [K_m^2(k\rho_e) + K_m^2(k\rho_h)] \quad (A.52)$$

No caso do potencial de interação entre os portadores e as imagens trocadas (e x h' / h x e') é dado por:

$$W_{ind}(r_e, r_h) = -\frac{1}{2} [II + III] \quad (A.53)$$

$$\begin{aligned}
W_{ind}(r_e, r_h) = & -\frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_2} \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \\
& \times \cos [k(z_e - z_h)] \cos [m(\theta_e - \theta_h)] K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h)
\end{aligned} \tag{A.54}$$

Para o terceiro caso onde o elétron está na região do core e o buraco na região do shell como ilustrado na Figura A.3:

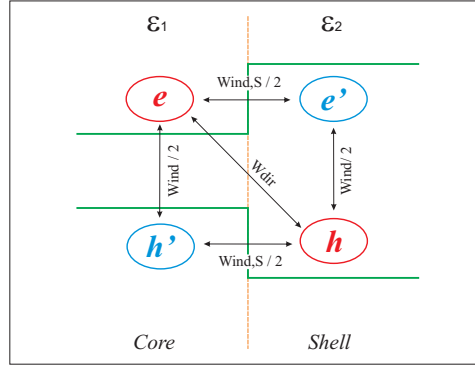


Figura A.3: - Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron está na região do *core* e o buraco está na região do *shell* e suas imagens estão respectivamente na região do *shell* e do *core*.

$$W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \int dre [\delta(r - r_e) - \delta(r - r_h)] [V_{in}(r, r_e) - V_{out}(r, r_h)]. \tag{A.55}$$

$$\begin{aligned}
W(r_e, r_h) = & \frac{1}{2} \left\{ \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_e) + \right. \\
& - \int dre \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_h) + \\
& - \int dre \delta(r - r_h) V_{in}(r, r_e) + \\
& \left. + \int dre \delta(r - r_h) V_{out}(r, r_h) \right\}.
\end{aligned} \tag{A.56}$$

Resolvendo a primeira integral, teremos:

$$I = \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_e) \tag{A.57}$$

$$\begin{aligned}
I = & \int dre \delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\epsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\
& \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right]
\end{aligned} \tag{A.58}$$

$$I = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1|r-r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_e) \quad (\text{A.59})$$

de modo que:

$$I = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1|r-r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m^2(k\rho_e) \quad (\text{A.60})$$

Resolvendo para a segunda integral, encontramos:

$$II = \int dr e\delta(r-r_e) V_{out}(r, r_h) \quad (\text{A.61})$$

$$II = \int dr e\delta(r-r_e) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r-r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z-z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.62})$$

Assim:

$$II = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2|r-r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times \cos[k(z-z_e)] \cos[m(\theta-\theta_e)] K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) \quad (\text{A.63})$$

Como nos casos anteriores foi negligenciado o termo $isen[m(\theta-\theta')]$.

Resolvendo a terceira integral, encontramos:

$$III = \int dr e\delta(r-r_h) V_{in}(r, r_e) \quad (\text{A.64})$$

$$III = \int dr e\delta(r-r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r-r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos[k(z-z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.65})$$

de modo que:

$$III = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1|r-r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times \cos[k(z-z_h)] \cos[m(\theta-\theta_h)] I_m(k\rho_h) I_m(k\rho_e) \quad (\text{A.66})$$

E por final resolvendo IV:

$$IV = \int dre\delta(r - r_h)V_{out}(r, r_h) \quad (A.67)$$

$$IV = \int dre\delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^\infty dk \cos[k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (A.68)$$

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \\ \times K_m(k\rho_h) K_m(k\rho_h) \quad (A.69)$$

Assim:

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_h) \quad (A.70)$$

Analogamente o 1º e 2º caso, temos que:

$$W(r_e - r_h) = \frac{1}{2} [(I + IV) - (II + III)] \quad (A.71)$$

Tomando a variação de W:

$$\delta W(r_e - r_h) = W_{dir}(r_e, r_h) + \Sigma_{e,h}(r_e, r_h) + W_{ind}(r_e, r_h) \quad (A.72)$$

onde: $W_{dir}(r_e, r_h)$ é o potencial de interação Coulombiano direto entre os portadores (elétrons e buracos), que é descrito por:

$$W_{dir}(r_e, r_h) = - \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{|r_e - r_h|} \quad (A.73)$$

Já o potencial de interação entre os portadores e suas próprias imagens é dado por (e x e' / h x h'):

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{1}{2} [I + IV] \quad (A.74)$$

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^\infty dk \right. \\ \left. \times \left\{ \left[\varepsilon_1 D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_h) \right] + \left[\varepsilon_2 C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m^2(k\rho_e) \right] \right\} \right] \quad (A.75)$$

No caso do potencial de interação entre os portadores e as imagens trocadas (e x h' / h x e'), é dado por:

$$W_{ind}(r_e, r_h) = -\frac{1}{2} [II + III] \quad (A.76)$$

$$W_{ind}(r_e, r_h) = - \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk \left\{ \varepsilon_1 D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) + \varepsilon_2 C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \right\} \right] \quad (A.77)$$

Quarto e último caso, elétron está na região do shell e o buraco na região do core, como denotado na Figura A.4:

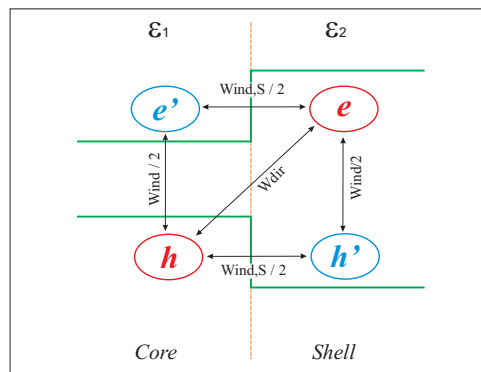


Figura A.4: - Representação gráfica da localização dos portadores, sendo que o elétron está na região do *shell* e o buraco está na região do *core* e suas imagens estão respectivamente na região do *core* e do *shell*.

$$W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \int dre [\delta(r - r_e) - \delta(r - r_h)] [V_{out}(r, r_e) - V_{in}(r, r_h)]. \quad (A.78)$$

$$W(r_e, r_h) = \frac{1}{2} \left\{ \int dre \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_e) + \right. \\ \left. - \int dre \delta(r - r_e) V_{in}(r, r_h) + \right. \\ \left. - \int dre \delta(r - r_h) V_{out}(r, r_e) + \right. \\ \left. + \int dre \delta(r - r_h) V_{in}(r, r_h) \right\}. \quad (A.79)$$

Resolvando a primeira integral, teremos:

$$I = \int dre \delta(r - r_e) V_{out}(r, r_e) \quad (A.80)$$

$$I = \int dre \delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right]$$

$$\times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \Big] \quad (\text{A.81})$$

$$I = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_e) \quad (\text{A.82})$$

de modo que:

$$I = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_e) \quad (\text{A.83})$$

Resolvendo para a segunda integral, teremos:

$$II = \int dr e\delta(r - r_e) V_{in}(r, r_h) \quad (\text{A.84})$$

$$II = \int dr e\delta(r - r_e) \frac{e}{4\pi\varepsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.85})$$

Assim:

$$II = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_1 |r - r_e|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_1} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \times \cos [k(z - z_e)] \cos [m(\theta - \theta_e)] I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \quad (\text{A.86})$$

Como nos casos anteriores foi negligenciado o termo $isen[m(\theta - \theta')]$. Resolvendo a terceira integral teremos:

$$III = \int dr e\delta(r - r_h) V_{out}(r, r_e) \quad (\text{A.87})$$

$$III = \int dr e\delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\varepsilon_2} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) K_m(k\rho) K_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.88})$$

Assim:

$$III = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_2 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\varepsilon_2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right)$$

$$\times \cos [k(z - z_h)] \cos [m(\theta - \theta_h)] K_m(k\rho_h) K_m(k\rho_e) \quad (\text{A.89})$$

E por final resolvendo a quarta integral:

$$IV = \int dr e \delta(r - r_h) V_{in}(r, r_h) \quad (\text{A.90})$$

$$IV = \int dr e \delta(r - r_h) \frac{e}{4\pi\epsilon_1} \left[\frac{1}{|r - r'|} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta - \theta')} \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} dk \cos [k(z - z')] C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) I_m(k\rho) I_m(k\rho') \right] \quad (\text{A.91})$$

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_1 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \\ \times I_m(k\rho_h) I_m(k\rho_h) \quad (\text{A.92})$$

de modo a se ter:

$$IV = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_1 |r - r_h|} + \frac{2e^2}{4\pi^2\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) I_m^2(k\rho_h) \quad (\text{A.93})$$

Analogamente aos casos anteriores, temos que:

$$W(r_e - r_h) = \frac{1}{2} [(I + IV) - (II + III)] \quad (\text{A.94})$$

Tomando a variação de W:

$$\delta W(r_e - r_h) = W_{dir}(r_e, r_h) + \Sigma_{e,h}(r_e, r_h) + W_{ind}(r_e, r_h) \quad (\text{A.95})$$

onde: $W_{dir}(r_e, r_h)$ é o potencial de interação Coulombiano direto entre os portadores (elétrons e buracos), que é descrito por:

$$W_{dir}(r_e, r_h) = - \left[\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2} \right] \frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{|r_e - r_h|} \quad (\text{A.96})$$

Já o potencial de interação entre os portadores e suas próprias imagens é dado por (e x e' / h x h'):

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \frac{1}{2} [I + IV] \quad (\text{A.97})$$

$$\Sigma_{e,h}(r_e, r_h) = \left[\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk \right. \\ \left. \times \left\{ \left[\epsilon_1 D_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) K_m^2(k\rho_h) \right] + \left[\epsilon_2 C_m \left(kR, \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) I_m^2(k\rho_e) \right] \right\} \right] \quad (\text{A.98})$$

No caso do potencial de interação entre os portadores e as imagens trocadas (e x h' / h x e') é:

$$W_{ind}(r_e, r_h) = -\frac{1}{2} [II + III] \quad (\text{A.99})$$

$$W_{ind}(r_e, r_h) = - \left[\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right] \left[\frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} - 1 \right) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dk \left\{ \varepsilon_1 D_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. \times K_m(k\rho_e) K_m(k\rho_h) + \varepsilon_2 C_m \left(kR, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right) I_m(k\rho_e) I_m(k\rho_h) \right\} \right] \quad (\text{A.100})$$

Bibliografia

- [1] <http://www.tecnosapiens.com.br/2008/09/historia-semicondutor-a-partir-de-1900> acessado em 03 de outubro de 2011;
- [2] G. E. Moore, *Electronics* 38, 8 (1965);
- [3] <http://info.abril.com.br/noticias/ti/sera-o-fim-da-lei-de-moore-10042009-10.shl> acessado em 03 de outubro de 2011;
- [4] L. Esaki and R. Tsu, *IBM Res. Note*, RC- 2418 (1969);
- [5] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* 14 ,61 (1970);
- [6] V. G. Dubrovskii, N. V. Sibirev, G. E. Cirlin, I. P. Soshnikov, W. H. Chen, R. Larde, E. Cadel, P. Pareige, T. Xu, B. Grandidier, J.-P. Nys, D. Stievenard, M. Moewe, L. C. Chuang and C. Chang-Hasnain⁵, *Phys. Rev. B.* 79, 205316 (2009);
- [7] Chung, J.Y., Li, H.D, Chang, W.H, Leung, T.C and Lin, D.S., *Phys. Rev. B.* 83, 085305 (2011);
- [8] N.N. Ha, K. Dohnalová and T. Gregorkiewicz *Phys. Rev. B.* 81, 195206 (2010);
- [9] F. Villalpando-Paez, L. G. Moura, C. Fantini, H. Muramatsu, T. Hayashi, Y. A. Kim, M. Endo, M. Terrones, M. A. Pimenta, and M. S. Dresselhaus *Phys. Rev. B.* 82, 155416 (2010);
- [10] <http://www.intel.com.br/content/www/br/pt/processors.html> acessado em 26 de outubro de 2011;
- [11] Xiaoxiao Zhu, Qiliang Li, Dimitris E Ioannou, Diefeng Gu, John E Bonevich, Helmut Baumgart, John S Suehle And Curt A Richter, *Nanotechnology* 22, 254020 (2011);
- [12] Yanjie Zhao, Joshua T. Smith, Joerg Appenzeller and Chen Yang, *Nano Letters* 11, 1406 (2011);
- [13] J. Costa e Silva, A. Chaves, J.A.K. Freire, V.N. Freire and G.A. Farias, *Phys. Rev. B.* 74, 085317 (2006);
- [14] Stefano R., Kristian N., Gvidas A., L. Samuelson, Lars E.W., Olov K. and Wacker A. *applied physics letters* 92, 253509 (2008);

-
- [15] T.A.S. Pereira, J.S. Sousa, J.A.K, and G.A.Farias, *Journal of Applied Physics*, 108, 054311 (2010);
- [16] A.F. Slachmuylders, B. Partoens, W. Magnus and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B*. 74, 235321 (2006);
- [17] Tetsuo Ogawa and Toshihide Takagahara, *Phys. Rev. B*. 43, 14325 (1991);
- [18] Rezende, S.M., *A Física de materiais e dispositivos eletrônicos*, Editora Edufpe (1996);
- [19] R. J. Le Roy and Y. Huang, *Journal Of Mol. Struc.* 591, 175 (2002);
- [20] M. Born and J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 84, 457 (1927);
- [21] Ashcroft, Neil W and Mermin, N. David, *Solid State Physics*, publishing Thomson Learning (1976);
- [22] Valls, M.R., *Theoretical Modelling of electrons and holes in semiconductor nanostructures*, thesis PHD. University Jaume I, Spain (2010);
- [23] M. G. Burt, *J. Phys. Condens. Matt.*, 11, 53 (1999);
- [24] T.A.S. Pereira, *Confinamento Dielétrico Versus Quântico em nanoestruturas*, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Ceará (2006);
- [25] S.M. Sze, Kwok K.NG. *Physics of Semiconductor Devices*, Third Edition, Editor: Wiley (2007);
- [26] M. Balkanski and R.F. Wallis, *Semiconductor Physics and Applications*, publishing Oxford University Press, (2000);
- [27] J. Sing, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, publishing MecGraw-Hill (1993);
- [28] Paul Harrison, *Quantum Wells, Wire and Dots*, publishing Wiley (2004);
- [29] P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui, *Nanotechnology* 16, 2903 (2005);
- [30] A. I. Persson, M. W. Larsson, S. Stenstrom, B. J. Ohlsson, L. Samuelson, L. R. Wallenberg, *Nano Materials* 3, 677 (2004);
- [31] G. Patriarche, F. Glas, M. Tchernycheva, C. Sartel, L. Largeau, and J. C. Harmand, *Nano Lett.* 8, 1638 (2008);
- [32] C. Chen, S. Shehata, C. Fradin, R. LaPierre, C. Couteau, and G. Weihs, *Nano Lett.* 7, 2584 (2007);
- [33] Z. H. Wu, X. Y. Mei, D. Kim, M. Blumin, and H. E. Ruda, *Appl. Phys. Lett.* 81, 5177 (2002);

- [34] D. Tsvion, M. Schwartzman, R. P. Biro, P. Huth, and E. Joselevich, *Science* 333, 1003 (2011);
- [35] Cui, Y., Lauhon, L. J., Gudiksen, M. S., Wang, J. F. and Lieber, C. M., *Appl. Phys. Lett.* 78, 2214 (2001);
- [36] B. Li, B. Partoens, F. M. Peeters, and W. Magnus *Phys. Rev. B* 79, 085306 (2009);
- [37] A. Chaves, J. C. Silva, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, *J. Appl. Phys.* 101, 113703 (2007);
- [38] L. Zhang, and H. Huang, *Appl. Phys. Lett.* 90, 023115 (2007);
- [39] Y. Zhang, L.-W. Wang, and A. Mascarenhas, *Nano Lett.* 7, 1264 (2007);
- [40] M. Amato, S. Ossicini, and R. Rurali, *Nano Lett.* 11, 594 (2011);
- [41] X. Duan, C. M. Lieber, *Adv. Mater.* 12, 298 (2000);
- [42] C. Chen, S. Shehata, C. Fradin, R. LaPierre, C. Couteau, G. Weihs, *Nano Lett.* 7, 2584 (2007);
- [43] Oliveira, C.L.Nunes, Excitons em sistemas quânticos 0-2D, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, UFC(2005);
- [44] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, *Appl. Surf. Science*, 234, 38 (2004);
- [45] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, *Appl. Surf. Science*, 237, 266 (2004);
- [46] M. L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic and Optical Properties of Semiconductors*, publishing Springer-Verlag, Germany (1988);
- [47] J. Frenkel, *Phys. Rev.* 37, 17 (1931);
- [48] J. Frenkel, *Phys. Rev.* 37, 1276 (1931);
- [49] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 52, 191 (1937);
- [50] N. F. Mott, *Trans. Faraday Soc.* 34, 500 (1938);
- [51] L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa and A. O. Govorov, *Phys. Rev. B.* 70, 155318 (2004);
- [52] B. Szafran, F. M. Peeters and S. Bednarek, *Phys. Rev. Lett.* 70, 125310 (2004);
- [53] J. Liu, A. Zaslavsky and L. B. Freund, *Phys. Rev. Lett.* 89, 096804 (2002);
- [54] Cardona, M. and Yu, Y.P., *Fundamentals of Semiconductor, Physics and materials properties*, Editor: Springer (2001);
- [55] Jasprit Singh, *Physics of semiconductors and their Heterostructures*, McGraw Hill (1993);

- [56] Sakurai, J.J., Modern Quantum Mechanics, Editor: Addison Wesley Longman, New York, (1994);
- [57] A. J. M. Giesbers, U. Zeitler, D. Reuter, A. D. Wieck, G. Biasiol, L. Sorba and J. C. Maan, Phys. E. 40, 1470, (2008);
- [58] D.J. BenDaniel and C.B. Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966);
- [59] C. N. L. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani, J. A. K. Freire, Microelectronics Journal, 36, 1049 (2005);
- [60] F. L. Madarasz, F. Szmulowicz, F. K. Hopkins, and D. L. Dorsey, Phys. Rev. B, 49, 13528 (1994);
- [61] A. Baladim, and Bandyopadhyay, Superlat. and Microstr. 19, 97 (1996);
- [62] A. Baladim, and Bandyopadhyay, Phys. Rev. B, 52, 8312 (1995);
- [63] Shun Lien Chuang, Physics Of Optoelectronic Devices, publishing John Wiley & Sons, Inc. (1995);
- [64] Gradshteyn, I.S., Ryzhik, I.M. and Jeffrey,A., Table of integrals, Series, and Products, Fifth Edition, Incorporation Academic Press, publishers (1965);
- [65] Chaves, A. Confinamento em fios quânticos semicondutores, dissertação de mestrado, Universidade Federal do Ceará, UFC (2007);
- [66] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Trird Edition, publishing John Wiley & Sons, Inc. (1998);
- [67] T. A. S. Pereira, M. G. Bezerra, J. A. K. Freire, V. N. Freire and G. A. Farias, Brazilian Journal of Physics, 36, 2A (2006);
- [68] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Solid State Commun. 45, 831 (1983);
- [69] T. A. S. Pereira, M. G. Bezerra, J. A. K. Freire, V. N. Freire and G. A. Farias, Brazilian Journal of Physics, 36, 347 (2006);
- [70] J. Cazaux, Semiconductors Sci. Technol. 13, 827 (1998);
- [71] D. A. B. Miller, D.S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood and C. A. Burrus, Phys. Rev. Lett. 53, 2173 (1984);
- [72] G. D. Wilk, R. M. Wallace and J. M. Anthony, Journal Appl. Phys. 89, 5243 (2001);
- [73] K. B. Joelson, W. X. Ni, G. Pozina, H. H. Radamson and G. V. Hanson, Appl. Phys. Lett. 71, 653 (1997);
- [74] Jerry W. Brown and Harold N. Spector, Phys. Rev. B. 35, 3009 (1987);

-
- [75] W. Wegscheider, L. N. PfeiKer, M. M. Dignam, A. Pinczuk, K. W. West, S. L. McCall, and R. Hull, Phys. Rev. Let. 71, 4071 (1993);
- [76] L. Bányai, I. Galbraith, C. Ell and H. Haug, Phys. Rev. B, 11, 36 (1987);
- [77] Takuya Yoshioka and Kenichi Asano, Phys. Rev. Let. 107, 256403 (2011);
- [78] A. F. Slachmuylders, B. Partoens, W. Magnus and F. M. Peeters, Phys. Rev. B, 76, 075405 (2007);