



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

LEYLANNE DAYSE OLIVEIRA

**BICAMADA POLARIZADA DE GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL
SOB AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO NO PLANO**

FORTALEZA

2020

LEYLANNE DAYSE OLIVEIRA

BICAMADA POLARIZADA DE GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL SOB
AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO NO PLANO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de mestre em Física. Área de concentração: matéria condensada.

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa

Coorientador: Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.

FORTALEZA

2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

O48b Oliveira, Leylanne Dayse.
Bicamada polarizada de gás de elétrons bidimensional sob ação de um campo magnético no plano. /
Leylanne Dayse Oliveira. – 2020.
42 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2020.

Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientação: Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior .

1. Gás de elétrons bidimensional. 2. Sistemas de baixa dimensionalidade. 3. Propriedades eletrônicas.
I. Título.

CDD 530

LEYLANNE DAYSE OLIVEIRA

BICAMADA POLARIZADA DE GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL
SOB AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO NO PLANO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: 27 / 03 / 2020.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)
Departamento de Física - UFC

Prof. Dr. João Milton Pereira Jr. (Coorientador)
Departamento de Física - UFC

Prof. Silvia Helena Roberto de Sena
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira - UNILAB

À Deus, à minha mãe e família, ao Stálio, ao doutor Jairo Amparo e aos Neurodiversos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Deus, conforto, refúgio e fonte de sabedoria e força em todos os momentos. Sem o qual não poderia ter chegado até aqui. Agradeço a minha mãe, que me acompanhou em toda a minha jornada acadêmica fazendo o possível e o impossível para manter-me motivada diante das muitas dificuldades. Zelando sempre para que as oportunidades não me fossem negadas diante dos obstáculos e características encontrados em mim por qualquer ser na função de educador. Sou profundamente grata também ao meu namorado, Stalio Rodrigues, por tirar minhas dúvidas nas contas deste trabalho e motivar e ser apoio em todas as circunstâncias. Aos meus irmãos igualmente neurodiversos pelas discussões científicas a seus modos e níveis de entendimento e pelas brincadeiras. A minha irmã e seu esposo por também motivarem e fazerem graça da vida. E ao meu pai, por se permitir crescer e aprender e assim poder me apoiar.

Agradeço aos meus amigos e irmãos na fé, tia Suely (in memorian), André Santos, Flávio Fontinelle, Renato Marques e César Silveira pelas orações, pela torcida e apoio, pelas conversas e pela companhia. E à tia Livramento e família por terem me acolhido e hospedado da melhor forma possível. Sou grata ao meu médico, doutor Jairo Amparo, por permanecer até o fim nesta caminhada, dedicando seu tempo e auxílio, instruindo e motivando. A doutora Isabela Leandro, pela perspicácia, sensibilidade e rapidez no diagnóstico e tratamento de Síndrome de Asperger. A Ricardo Marques, pela sensibilidade, compaixão e novas visões da vida e de mim mesma as quais foi capaz de me apresentar e ensinar. E ao professor Marcelo Teles, por sua visão empática e inclusiva e pelos novos desafios que me permitiu enfrentar com êxito durante este período de mestrado.

Agradeço aos meus colegas de graduação do IFCE campus Acaraú, Gerson Rodrigues, Guido, Helaine Cristina, Ejakson, Marciano Rufino, Benjamin Rodrigues, Daniel Eder, Tiago Souza, Israel Nascimento e Marciel Carvalho, pelo constante apoio, pelas brincadeiras e risadas, pelas dúvidas tiradas e pela motivação. Aos professores Henrique Camelo (in memorian), João Cláudio Nunes e demais professores de graduação, que ensinaram muito mais do que física, ensinaram para a vida, e foram exemplo e motivação para que eu ingressasse no mestrado.

Agradeço aos professores Diego Rabelo, Milton Pereira e Paulo de Tarso, que diferente do senso comum, nunca me mandaram para casa, mas de alguma forma acreditaram no meu potencial, apesar de minhas limitações. Aos dois primeiros devo especial agradecimento pela orientação neste trabalho, principalmente o professor Diego, que me acompanhou durante todo o período no mestrado como colega e professor, tirando dúvidas e orientando. Aos colegas e amigos da UFC: Jonathan, Nathanael, Sofia Cunha, Danilo Borges, Michel Rodrigues, Pedro Henrique, Raul Peixoto, Everton Almeida, Adailton, Gabriel Oliveira, Ravenna Oliveira, Luan, Levi, Lucas Cavalcante, e demais colegas do

GTMC, por me incluírem como possível, tirarem minhas dúvidas e fazerem companhia. E agradeço ao Departamento de Física da UFC pela oportunidade e ao CNPq e à CAPES pelo investimento financeiro neste projeto. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“Prepara-se o cavalo para o dia da batalha, porém do Senhor vem a vitória.” (Provérbios 21;31)

“Mas Deus escolheu as coisas loucas deste mundo para confundir as sábias; e Deus escolheu as coisas fracas deste mundo para confundir as fortes;[...] Para que nenhuma carne se glorie perante ele. Para que, como está escrito: Aquele que se gloria glorie-se no Senhor.” (1 Coríntios 1:27,29 e 31 - Bíblia Sagrada-ACF)

“Loucos ganham fé no caos. [...] Loucos dormem bem em paz, como se em tudo Deus fosse mais.” (Zé Bruno - Banda Resgate)

RESUMO

Investigamos analiticamente as propriedades eletrônicas de um gás de elétrons bidimensional (2DEG) confinado em um sistema de bicamada acoplada, ou seja, duas camadas de 2DEG, sob o efeito de um campo magnético no plano e um campo elétrico fora do plano. Tais sistemas do tipo bicamada de 2DEG são sistemas quânticos muito interessantes e foram amplamente estudados nas últimas décadas devido a muitos fenômenos possíveis em conexão com o tunelamento entre as duas camadas de 2DEG, de maneira semelhante às estruturas de poços quânticos duplos com um grau eletrônico adicional de liberdade na direção do crescimento. Ao resolver o Hamiltoniano 2×2 de Schrödinger, com os termos (fora) diagonais que descrevem (o acoplamento entre as camadas) as camadas de 2DEG superior e inferior, calculamos o espectro de energia para diferentes configurações do sistema e discutimos os efeitos de campos elétricos e magnéticos externos, bem como as consequências do termo de acoplamento nesses espectros. Dentro dessa aproximação de massa efetiva de duas bandas, considerou-se também que as duas camadas são rotacionadas uma em relação à outra e que elas podem ser formadas por diferentes semicondutores anisotrópicos, ou seja, com diferentes massas efetivas ao longo das direções x e y em cada camada de 2DEG. Mostramos que: (i) o termo de energia de acoplamento entre as camadas quebra a degenerescência dos estados; (ii) a presença de um campo magnético no plano causa uma mudança transversal linear no momento, isto é, os níveis de energia correspondentes a diferentes camadas de 2DEG são deslocados em direções opostas no espaço dos momentos, o que leva ao (anti-)cruzamento das curvas de dispersão de energia quando o termo de acoplamento (não) é levado em consideração; (iii) na presença de campos elétricos e magnéticos, pode-se observar uma distorção dos dois ramos de energia com a formação de uma estrutura de dois vales com diferentes superfícies de Fermi.

Palavras-chave: Gás de elétrons bidimensional; Sistemas de baixa dimensionalidade; Propriedades eletrônicas.

ABSTRACT

We have analytically investigated the electronic properties of a two-dimensional electron gas (2DEG) confined in a coupled bilayer system, i.e. two 2DEG layers, under the effect of an in-plane magnetic field and out-of-plane electric field. Such bilayer 2DEG-like systems are very interesting quantum systems and were widely studied in the past decades due to many possible phenomena in connection with the tunneling between the two 2DEG layers, in a similar way as in double quantum well structures with an additional electronic degree of freedom in the growth direction. By solving the 2×2 Schrödinger Hamiltonian, with the (off-) diagonal terms describing the top and bottom 2DEG layers (the coupling between the layers), we calculate the energy spectrum for different system configurations and discuss the effects of external electric and magnetic fields, as well as the consequences of coupling term on it. Within this two-band effective mass approximation, one also considers that the two layers are twisted with respect to each other and that they can be formed by different anisotropic semiconductors, i. e. with different effective masses along the x and y directions in each 2DEG layer. We show that: (i) the coupling energy term between the layers breaks the degeneracy of the states; (ii) the presence of an in-plane magnetic field causes a linear transverse shift in momentum, i. e. the energy levels corresponding to different 2DEG layers are shifted in opposite directions in the wave-vector space, which leads to the (anti-) crossing of the energy dispersion curves when the coupling term is (not) taking in account; (iii) in the presence of both electric and magnetic fields, one can observe a distortion of the two energy branches with a formation of a two-valley structure with different Fermi surfaces.

Keywords: Two-dimensional electron gas; Low dimensional systems; Electronic properties.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Potencial periódico.	14
Figura 2 – Superposição dos valores de k	20
Figura 3 – Primeira zona de Brillouin.	21
Figura 4 – Heteroestrutura.	26
Figura 5 – Poço de potencial de uma heteroestrutura.	28
Figura 6 – Representação esquemática dos dois planos π_1 e π_2 de gás de elétrons bidimensional acoplados por um termo de energia Δ e submetido a potenciais elétricos U_1 e U_2 , respectivamente.	29
Figura 7 – Representação gráfica da energia em função do momento com campo magnético e potenciais elétricos iguais à zero.	31
Figura 8 – Esboço da energia em função do momento para um sistema formado por uma bicamada de gás de elétrons bidimensional com termo de acoplamento Δ na ausência de campo magnético e na presença de campo elétrico perpendicular ao plano do gás de elétrons bidimensional.	33
Figura 9 – Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 e δU maiores que zero.	39
Figura 10 – Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 igual a zero e δU maior que zero.	39
Figura 11 – Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 igual a zero e δU menor que zero.	39

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Bandas de energia	12
1.1.1	<i>Teorema de Bloch</i>	14
1.1.2	<i>Condições de Born - Von Karman</i>	16
1.2	Modelo quântico do gás de elétrons	17
1.3	Gás de elétrons em um potencial fraco	20
1.4	Semicondutores	23
1.5	Massa efetiva	24
1.6	Confinamento quântico	25
1.7	Espectro do trabalho	26
2	ESPECTRO DE ENERGIA DE UMA BICAMADA BIDIMEN- SIONAL DO GÁS DE ELÉTRONS	28
2.1	Na ausência do campo magnético	28
2.1.1	<i>Na ausência do campo elétrico</i>	30
2.1.2	<i>Na presença de campo elétrico</i>	31
2.2	Na presença do campo magnético no plano	34
2.2.1	<i>Para $\vec{k} = (0, k_y, 0)$</i>	37
2.2.2	<i>Para $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$</i>	37
3	CONCLUSÃO	40
	REFERÊNCIAS	41

1 INTRODUÇÃO

Materiais com gás de elétrons bidimensional são de amplo interesse para a pesquisa básica e para aplicações tecnológicas. Estão na base dos atuais avanços da microeletrônica, por isso têm sido amplamente estudados.

Essas estruturas semicondutoras com gás de elétrons bidimensional podem ser formadas, por exemplo, a partir de heteroestruturas de materiais dos grupos *III* e *V* da tabela periódica, como *GaAs* e *AlGaAs*. Ou ainda através de materiais bidimensionais como o grafeno. Desde a década de setenta, quando se idealizou e passou-se a fabricar heteroestruturas semicondutoras, o crescimento de materiais semicondutores vem aumentando, assim como os estudos na área. As técnicas desenvolvidas permitem a fabricação de heteroestruturas semicondutoras com várias arquiteturas, que estão na base de inúmeros dispositivos eletrônicos. Entre eles, a fabricação de LASERs (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) obtidos a partir de poços quânticos de *GaN* que emitem luz azul, contribuiu profundamente no aprimoramento do conhecimento de materiais com propriedades similares, devido ao seu grande interesse comercial.

O gás de elétrons bidimensional foi amplamente estudado nas décadas de 90 e 2000. Diversas pesquisas foram feitas na área. Entre eles, a heteroestrutura formada por *GaAs* e *AlGaAs* se destaca em vários trabalhos.

O gás de elétrons bidimensional pode ser obtido através da heterojunção entre dois materiais semicondutores cujas energias de gap são diferentes. Quando esses dois materiais de energias de gaps diferentes se unem, há uma descontinuidade entre as bandas de energia. Os elétrons livres no semicondutor de maior gap migram para o material cujo potencial é menor, deixando para trás "buracos". Devido à diferença nos gaps se forma um poço de potencial, próximo à junção dos materiais, para os elétrons na banda de condução do semicondutor de menor gap. Os elétrons que se encontram no poço de potencial estão confinados na direção z , e livres no plano. Assim se forma o gás de elétrons bidimensional, no caso de apenas um nível do poço estar ocupado.

Neste trabalho estudamos o acoplamento entre dois poços quânticos, seja por heteroestruturas ou por materiais bidimensionais, formando uma bicamada de gás de elétrons bidimensional. Estruturas assim também foram amplamente estudadas no meio científico. Existem inúmeros trabalhos utilizando bicamada de gás de elétrons bidimensional. Neles são aplicados campos elétricos e/ou magnéticos na estrutura e observados os efeitos físicos nas bandas de energia.

1.1 Bandas de energia

Ao considerarmos átomos de um elétron isolados observamos níveis de energia discretos. O elétron pode possuir estados em orbitais do tipo 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, e assim

por diante. Em átomos com muitos elétrons, estes se distribuem em pares, conforme o Princípio da Exclusão de Pauli, dos níveis de menor energia para os de maior energia, na chamada camada de valência. Nesta, os elétrons que a ocupam são responsáveis por diversas propriedades e interações com outros átomos, e, uma vez excitados com energia suficiente, passam para a camada de condução, deixando uma lacuna (ou buraco) na camada de valência.

Aqui iremos considerar uma série de átomos próximos o suficiente para gerarem um potencial periódico, como em uma estrutura cristalina. Inicialmente, dois átomos separados interagem com suas funções de onda a partir de níveis discretos de energia. Porém ao aproximarmos os átomos suas funções de onda se desdobram, gerando novos níveis de energia, sendo possível observar uma superposição dos estados degenerados. Em uma rede cristalina com N átomos idênticos esses vários novos níveis discretos se aproximam formando bandas de energia quase contínuas. Quando ocorre esta superposição a equação de Schrödinger não apresenta solução para determinados valores de energia, gerando zonas proibidas.

Cada nível nessas bandas de energia é preenchido, do menor para o maior, pelos elétrons em pares de spins opostos, até atingirem a última camada abaixo da energia de Fermi, a chamada banda de valência. A camada imediatamente acima da energia de Fermi, a banda de condução, pode ser acessada pelos elétrons da banda de valência desde que recebam o valor de energia necessário para isso. No caso de metais, a última banda é interceptada pela energia de Fermi, os elétrons costumam preencher parcialmente o nível de energia abaixo dela, porém, não havendo *gap*, podem facilmente superar a energia de Fermi. O oposto ocorre com isolantes, onde o *gap* entre as bandas de valência e de condução é significativamente grande. Já em semicondutores o *gap* existente entre essas bandas é pequeno, por volta de 1 a 2 eV, o que os torna convenientemente úteis em dispositivos eletrônicos.

Uma série de variáveis, como impurezas, temperatura do sólido e as vibrações intrínsecas dos íons, podem interferir no potencial pelo qual os elétrons interagem. Porém, iremos considerar um cristal hipotético ideal, livre de quaisquer impurezas, com íons perfeitamente posicionados, cujas propriedades que possam causar variações no potencial serão consideradas como pequenas perturbações, a fim de garantir um potencial periódico U da forma:

$$U(\mathbf{R} + \mathbf{r}) = U(\mathbf{R}), \quad (1)$$

sendo \mathbf{R} todos os vetores da rede de Bravais.

Além disso precisaremos considerar o problema partindo do pressuposto que estamos tratando de apenas um elétron que interage com um potencial periódico devido ao núcleo dos íons e aos demais elétrons (interação elétron-elétron). Para melhor compreendermos o efeito da periodicidade do potencial no movimento eletrônico será necessário

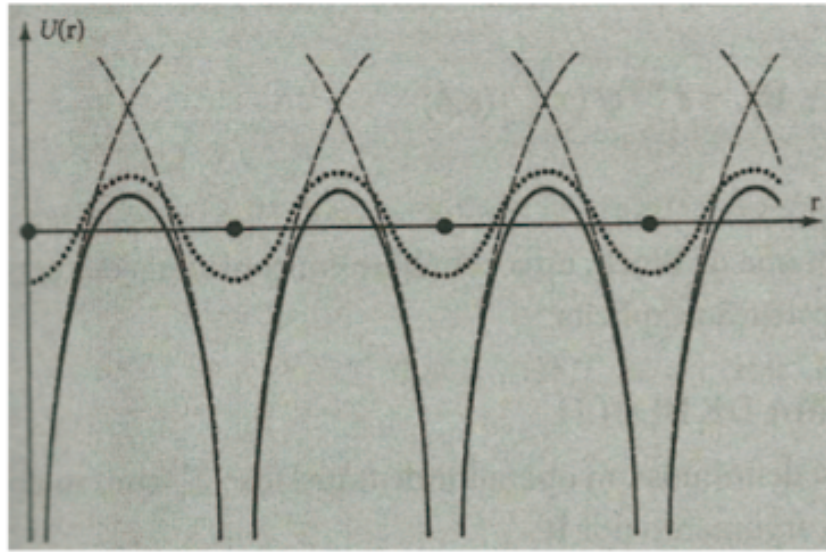


Figura 1: Potencial periódico.

utilizarmos o teorema de Bloch.

1.1.1 Teorema de Bloch

Segundo De Broglie (10) uma partícula de momento p tem um comprimento de onda associado ao autovalor λ dado por

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (2)$$

Logo, um elétron no vácuo em uma posição \mathbf{r} e sem influência de qualquer potenciais eletromagnéticos, pode ser escrito na forma de uma onda, ou seja,

$$\psi = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (3)$$

onde t é o tempo e ω é a frequência angular. Além disso, o módulo do vetor de onda é dado por

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (4)$$

O momento mecânico quântico pode ser visto como um operador linear, agindo sobre a função de onda ψ com o momento \mathbf{p} , obtendo um autovalor, ou seja,

$$-i\hbar\nabla\psi = \mathbf{p}\psi, \quad (5)$$

onde

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}. \quad (6)$$

Substituindo a equação (3) em (5), obtemos:

$$-i\hbar\nabla e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = \mathbf{p}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (7)$$

isto implica que

$$-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}\right)e^{i(k_x x + y_y y + z_z z - \omega t)} = \mathbf{p}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}. \quad (8)$$

E, portanto,

$$-i\hbar(i k_x \hat{i} + i k_y \hat{j} + i k_z \hat{k})e^{i(k_x x + y_y y + z_z z - \omega t)} = \mathbf{p}e^{i(k_0 r - \omega t)}. \quad (9)$$

Logo, obtemos

$$\mathbf{p} = \hbar(k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}) = \hbar\mathbf{k}, \quad (10)$$

o qual seu módulo pode ser escrito na forma $|\mathbf{p}| = \hbar\mathbf{k} = \left(\frac{h}{2\pi}\right)\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)$, produzindo a equação (2). Pela mecânica clássica, a energia cinética de uma partícula de massa m é dada por:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \quad (11)$$

De modo análogo, pode-se esperar da mecânica quântica que tal equação possa ser representada por uma equação de autovalor com um operador:

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2\psi = E\psi, \quad (12)$$

ou ainda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi, \quad (13)$$

onde E é o autovalor da energia cinética e

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (14)$$

Sabendo disto, vamos considerar agora a equação (13) com a adição de um potencial, no modelo do elétron quase livre, onde temos agora:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi = E\psi, \quad (15)$$

o que torna o modelo do elétron livre um caso especial da equação (15), com o potencial é nulo. O potencial periódico possui uma simetria de translação conforme a equação (1) o que implica numa simetria também na Hamiltoniana. Os elétrons, agora chamados elétrons de Bloch, devido ao potencial periódico, passa a ter estados estacionários cuja

propriedade é descrita pelo Teorema de Bloch

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}, \quad (16)$$

onde $u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{kr})$, o que nos leva a seguinte equação

$$\psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{nk}(\mathbf{r}). \quad (17)$$

Assim, o Teorema de Bloch pode ser reescrito como

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}), \quad (18)$$

ou ainda, conforme o enunciado: As soluções não degeneradas da equação de Schrödinger (15), $\psi_{nk}(\mathbf{r})$, e as combinações lineares adequadas das soluções degeneradas são simultaneamente autofunções do operador $\hat{\mathbf{R}}$ (que representa as translações da rede) com autovalores $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$.

1.1.2 Condições de Born - Von Karman

Condições de contorno são necessárias para serem aplicadas ao Teorema de Bloch. Optaremos portanto em adotar condições de contorno periódicas, onde a função de onda válida dentro de uma região, ou célula, se repete fora dela, o que nos leva a uma quantização da energia do sistema. Além disso, as propriedades do material não dependem das condições de contorno, nos permitindo adotar aquela que mais nos convêm.

Portanto, tomamos uma rede de Bravais com vetor posição \mathbf{R} dado por:

$$\mathbf{R} = N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3, \quad (19)$$

onde N_i são números inteiros positivos, com $N = N_1 N_2 N_3$ sendo o número total de células primitivas no cristal, e \mathbf{a}_i os vetores de uma célula primitiva. Cada ponto \mathbf{R} é associado a uma operação de simetria de translação, definindo a periodicidade da rede de Bravais com N_i células na direção \mathbf{a}_i . Pelo Teorema de Bloch temos a função de onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, onde o vetor de onda \mathbf{k} pode ser escrito como

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3, \quad (20)$$

sendo \mathbf{b}_i os vetores da célula unitária no espaço recíproco, onde o conjunto de todos os vetores de onda \mathbf{k} e suas correspondentes ondas planas $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ possuem a mesma periodicidade da rede de Bravais. Portanto os vetores \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 e \mathbf{b}_3 construídos a partir dos vetores

primitivos \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 da rede de Bravais são:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \quad (21)$$

Note que a partir das equações definidas em (21), obtemos

$$\mathbf{b}_j \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi \delta_{ij}, \quad (22)$$

para $i = 1, 2, 3$ onde δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Portanto, aplicando as condições de contorno periódicas, ou de, Born-Von Karman, temos $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r})$ e para $\mathbf{R} = N_i \mathbf{a}_i$, sendo $i = 1, 2, 3$, obtemos:

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), \quad (23)$$

e nos estados de Bloch, temos

$$\psi_{nk}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \psi_{nk}(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Isto nos conduz a concluir que $e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1$ para $i = 1, 2, 3$. Agora, considerando as equações (20) e (22), temos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi k_i$ para todo $i = 1, 2, 3$. Assim, obtemos

$$e^{2\pi i N_i k_i} = 1, \quad (25)$$

para $i = 1, 2, 3$, ou seja, pela Relação de Euler, $\cos(2\pi N_i k_i) + i \sin(2\pi N_i k_i) = 1$, o que implica $\cos(2\pi N_i k_i) = 1$ e $\sin(2\pi N_i k_i) = 0$ e, portanto, $N_i k_i = m_i$, onde m_i é um número inteiro. Assim, podemos escrever

$$k_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad (26)$$

para $i = 1, 2, 3$. Logo, as equações (20) e (26) nos levam a forma geral para os vetores de onda do momento cristalino permitidos nos estados de Bloch, ou seja, $\mathbf{k} = \frac{m_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \mathbf{b}_3$ ou ainda,

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i. \quad (27)$$

Onde podemos notar que o vetor de onda do momento magnético \mathbf{k} possui valores reais e discretos e o seu número coincide com o número de células do cristal.

1.2 Modelo quântico do gás de elétrons

Quando temos uma heterojunção de dois materiais semicondutores, ou seja, dois semicondutores cujas energias de *gap* são diferentes, os elétrons ficam confinados na interface entre os materiais. Formam-se, devido a diferença nos valores das bandas de

energia, uma barreira de potencial, semelhante a um poço quântico. Assim, o movimento dos elétrons se dá no xy . Algo semelhante pode ser observado em materiais bidimensionais, onde também podemos observar um gás de elétrons na superfície do material cuja espessura não passa de um átomo.

Sommerfield formulou uma teoria quântica do gás de elétrons na qual não considera o gás ideal clássico como Drude. De forma análoga ao modelo de Drude temos as aproximações dos elétrons livres e independentes, ou seja, desprezando as interações entre os elétrons e potencial da rede e entre elétron-elétron. Todavia diferente da visão clássica, onde não há qualquer interação entre os férmions, quanticamente as funções de onda dos elétrons podem se superpor. Isto é interessante pois à temperatura zero absoluto as partículas não estão completamente paradas, mas ainda possuem uma certa fração de energia. Temos assim um modelo quântico para o gás de elétrons, conforme é descrito em (1).

Para tanto, iremos considerar partículas livres em uma caixa de volume V , onde não há íons ou colisões. Resolvendo a equação de Schrödinger para uma partícula livre em três dimensões, temos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (28)$$

cujas autofunções são dadas por

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (29)$$

onde $\frac{1}{\sqrt{V}}$ é o fator de normalização, obtido a partir da condição $\int_V \psi^* \psi dr = 1$ e $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, com autoenergias

$$E(k) = \frac{\hbar^2 \times k^2}{2m}. \quad (30)$$

Agora, tomando as condições de contorno de Born-Von Karman

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z), \quad (31a)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z), \quad (31b)$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z), \quad (31c)$$

aplicadas ao gás de elétrons dentro de uma caixa cúbica de volume $V = L^3$ na equação (29), temos para o vetor de onda as seguintes condições de contorno:

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1. \quad (32)$$

O que implica em valores quantizados para k_x , k_y e k_z :

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \quad (33)$$

onde n_x , n_y e n_z são números inteiros. Podemos então representar o volume elementar no espaço tridimensional dos momentos k como sendo

$$\Delta V_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{V}, \quad (34)$$

onde cada ponto no espaço recíproco representa um estado eletrônico possível. No estado fundamental, os elétrons são distribuídos de acordo com o princípio de exclusão de Pauli onde cada estado pode acomodar até dois elétrons de spins opostos. Estes são distribuídos, do menor ao maior estado de energia k , sendo este último o vetor de onda de Fermi (k_F), o qual define o raio da esfera de Fermi no espaço dos momentos. Uma vez que temos um número muito grande de elétrons, o volume da esfera no espaço k é dado por $V_F = \frac{4}{3}\pi k_F^3$ e sua divisão pelo volume elementar (equação (34) do espaço k vezes 2, devido aos spins dos elétrons) resulta no número total de elétrons N , ou seja,

$$N = \left(\frac{V_F}{\Delta V_k}\right) 2 = 2 \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V. \quad (35)$$

Desta forma podemos escrever k_F como

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (36)$$

ou seja, o vetor de Fermi depende apenas da densidade n do gás de elétrons. Daí podemos obter a energia, a velocidade e a temperatura de Fermi

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

,

$$v_F = \frac{\hbar^2 k_F}{m}$$

,

$$T_F = \frac{E_F}{k_B}$$

, respectivamente. A energia do estado fundamental será a soma das energias dos estados de 0 a k_F , de acordo com a soma abaixo

$$U = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (37)$$

Agora, usando o conceito de integral de Riemann, a equação (37) pode ser aproximada a

$$\sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V}{8\pi^3} \int_0^{k_F} d^3k. \quad (38)$$

Assim, podemos escrever $U = \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k_F} d^3k$, ou seja,

$$\frac{U}{V} = u = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{k_F} 4\pi k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dk = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{10m} = \frac{3}{5} n E_F. \quad (39)$$

1.3 Gás de elétrons em um potencial fraco

Vamos considerar agora elétrons na aproximação dos elétrons independentes, que não interagem entre si, mas interagem com um potencial fraco da rede, o que chamamos de modelo do elétron quase livre. Diferente do modelo do elétron livre, em que há um valor de k para cada valor de energia, no modelo do elétron quase livre passamos a ter regiões de valores de energia proibidos, onde não há equivalente para k . Ou seja, passamos a ter lacunas, ou *gaps*, e bandas de energia permitidas. No modelo de partícula livre, o momento linear \mathbf{k} se conserva enquanto que quando temos uma partícula na rede de Bravais K , chamado agora de momento cristalino, se conserva apenas a menos de um vetor da rede recíproca. Na rede periódica, pelo Teorema de Bloch, todas as soluções podem ser escritas como somatório que envolvem apenas certos k , um conjunto de momentos possíveis, possuindo várias soluções diferente para o mesmo k , ou seja, há uma superposição com diferentes valores de k .

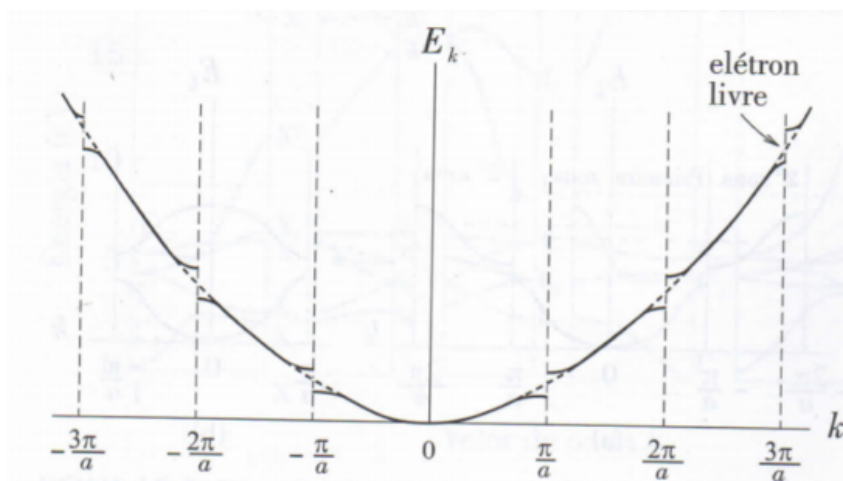


Figura 2: Superposição dos valores de k .

Os valores de energia E_k se repetem a cada intervalo de k múltiplo de $\frac{2\pi}{a}$ que podem ser bem representados na primeira zona de Brillouin, veja Figura (2). Os k_s possíveis são múltiplos inteiros de $-\frac{\pi}{a}$ e há degenerescência na bordas das zonas de

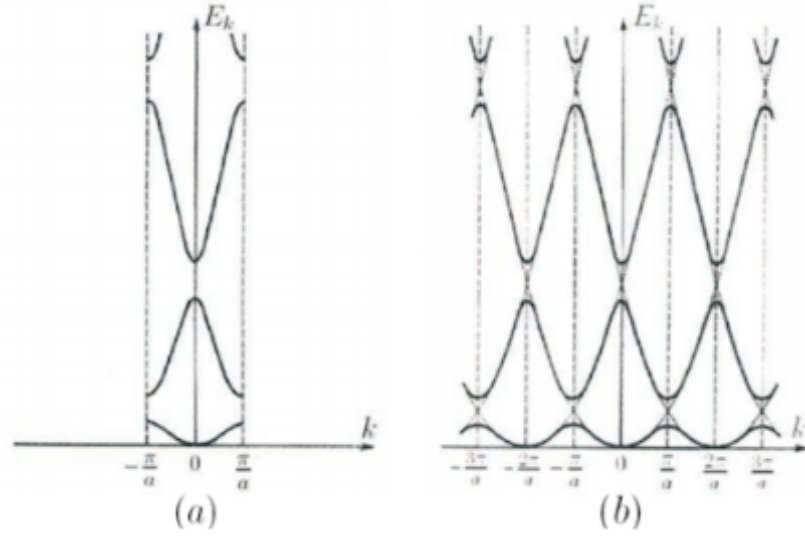


Figura 3: Primeira zona de Brillouin.

Brillouin, onde encontramos os *gaps* de energia

$$k = -\frac{\pi}{a}n, \quad \text{onde } n \in \mathbb{Z}$$

Assim, iremos expandir o potencial $U(\mathbf{r})$ em uma série do tipo

$$U(\mathbf{r}) = \sum_K U_K e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (40)$$

onde U_K são os coeficientes de Fourier do potencial.

Neste caso, devido ao potencial periódico equação (1), a função de onda ψ_k dos elétrons quase livres será expandida em uma série de ondas planas, tal como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k C_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (41)$$

Substituindo na equação (15) as equações (40) e (41), e sabendo que $\nabla^2 \psi(r) = -k^2 \psi(r)$, temos que

$$\sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{k,K} C_k U_K e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} = E \sum_k C_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (42)$$

ou ainda,

$$\sum_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = - \sum_k \left(\sum_K U_K \right) C_k e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}. \quad (43)$$

Fazendo a substituição $\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ no lado direito da equação (43), obtemos:

$$\sum_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_k e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = - \sum_k \left(\sum_K U_K \right) C_{k-K} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}. \quad (44)$$

Comparando os coeficientes da equação (44), tem-se

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_k + \sum_K U_K C_{k-K} = 0. \quad (45)$$

Vamos supor agora que $U(\mathbf{r})$ possui apenas um coeficiente de Fourier associado ao valor mínimo de \mathbf{K} , que denominaremos de \mathbf{G} . Tomando $U_G = U_{-G} = U$, a equação (45), que terá apenas dois termos (U_G e U_{-G}) e valerá para todos os valores de k dentro da primeira zona de Brillouin, ficará da forma

$$UC_{k-G} + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_k + UC_{k+G} = 0. \quad (46)$$

Como os efeitos do potencial sobre o elétron são mais visíveis nas regiões próximas aos limites da zona de Brillouin, tomaremos $k = \pm \frac{G}{2}$, onde $\frac{G}{2} = \frac{\pi}{a}$. E da equação (46) obtemos as equações

$$UC_{-G/2} + (\lambda_{G/2} - E) C_{G/2} = 0 \quad (47)$$

e

$$(\lambda_{-G/2} - E) C_{-G/2} + UC_{G/2} = 0, \quad (48)$$

onde $\lambda_{-G/2} = \lambda_{G/2} = \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Obtemos as energias do elétron, igualando a zero o determinante formado pelas equações (47) e (48), ou seja,

$$\begin{vmatrix} U & \lambda_{G/2} - E \\ \lambda_{-G/2} - E & U \end{vmatrix} = 0.$$

Como $\lambda_{-G/2} = \lambda_{G/2}$, temos $U^2 - (\lambda_{G/2} - E)^2 = 0$ e, portanto,

$$E = \lambda_{G/2} \pm U = \frac{\hbar^2 G^2}{8m} \pm U. \quad (49)$$

Pela equação (47), temos $C_{G/2} = \frac{-U}{\lambda_{G/2} - E} C_{-G/2} = 0$ e usando a equação (49) obtemos

$$C_{G/2} = \pm C_{-G/2}. \quad (50)$$

Logo, para obtermos as funções de onda tomamos a equação (50) e substituímos na equação (41) chegando nos seguintes resultados:

$$\psi_+(x) = C_{G/2} (e^{iGx/2} + e^{-iGx/2}) = 2C_{G/2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (51)$$

e

$$\psi_-(x) = C_{G/2} (e^{iGx/2} - e^{-iGx/2}) = 2iC_{G/2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad (52)$$

onde $\frac{G}{2} = \frac{\pi}{a}$. Tais funções de onda são estacionárias e representam distribuições espaciais de cargas opostas. A razão física para o surgimento da energia de *gap*, equivalente a $2U$ nas bordas da zona de Brillouin, se dá devido a diferença no valor médio da energia potencial.

1.4 Semicondutores

A formação de bandas de energia separadas por regiões proibidas, chamadas *gaps* de energia, é responsável por uma importante forma de caracterização dos materiais a partir de suas propriedades eletrônicas. A banda de valência é a última banda de energia completamente preenchida pelos elétrons do material, enquanto que a banda seguinte, que pode ou não estar parcialmente preenchida é a banda de condução. Quando o material possui elétrons que preenchem parcialmente a última banda, ele conduz eletricidade. E a distribuição dos elétrons obedece ao princípio da exclusão de Pauli, preenchendo cada nível, da menor energia para a maior.

Aqueles materiais aos quais caracterizamos como metais condutores possuem naturalmente sua última banda de energia apenas parcialmente preenchida, como é o caso dos metais alcalinos terrosos e metais nobres (Mg^{12} , Sr^{38} , Ba^{56} , Cu^{29} , Au^{79}). Para acessarem os níveis de energia acima da energia de Fermi necessitam de pouco esforço. Assim, são bons condutores ainda que no estado fundamental onde $T = 0K$.

Porém, materiais cuja última banda é completamente preenchida no estado fundamental, possuem maior dificuldade na transição de seus elétrons para a próxima banda, acima da energia de Fermi, quando submetidos a uma temperatura acima de $0K$. Estes materiais cuja separação entre o nível mais alto da banda de valência é significativamente distante do nível mais baixo da banda de condução, são chamados de isolantes, como o óxido de silício SiO_2 cuja energia de *gaps* é de $8eV$. Outros materiais como o $GaAs$ ou o Silício (Si), também possuem uma separação, ainda que bem menor, entre o nível mais alto da banda de valência e o nível mais baixo da banda de condução, porém, sua energia de *gaps* é da ordem de $1eV$. O que significa que estes materiais também são isolantes no estado fundamental, mas podem conduzir facilmente ao sair dele, bastando apenas que recebam energia suficiente para superar o *gaps*, por tal característica são chamados de semicondutores. Quanto menor for a energia de *gap* e maior for a temperatura, melhor será a condutividade. Quando este processo de promoção do elétron da camada de valência para a camada de condução ocorre, o elétron deixa uma lacuna na camada de valência que se comporta como um portador de carga positiva.

1.5 Massa efetiva

Se faz necessário compreender o comportamento dos portadores de carga nos semicondutores uma vez que submetidos a um campo elétrico externo. Para tanto usaremos o conceito de pacote de onda, cuja velocidade do grupo de ondas é dada por

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial \kappa}. \quad (53)$$

Sabendo que a energia do elétron é dada por $E = \hbar\omega$, então pela Regra da Cadeia podemos obter, usando a equação (53):

$$\frac{\partial E}{\partial \kappa} = \frac{\partial E}{\partial \omega} \cdot \frac{\partial \omega}{\partial \kappa} = \hbar v_g. \quad (54)$$

Logo, $\partial E = \hbar v_g \partial \kappa$. Ao aplicarmos um campo elétrico externo o elétron será submetido a uma força \mathbf{F} e sua energia irá variar dE durante um percurso dx . Assim, o trabalho realizado será $dE = F dx$ ou ainda,

$$F dx = \hbar v_g d\kappa, \quad (55)$$

pela definição da velocidade $dx = v_g dt$, logo

$$F v_g dt = \hbar v_g d\kappa \quad (56)$$

$$F = \hbar \frac{d\kappa}{dt}, \quad (57)$$

onde $\hbar\kappa$ é o momento do portador de carga. Apesar dos portadores de carga se encontrarem dentro da rede cristalina, submetidos portanto ao potencial periódico, este potencial não influencia de forma significativa no movimento do elétron. Como vemos na equação (57), onde temos uma representação do Princípio Fundamental da Dinâmica $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$, sendo o momento do elétron $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Logo, o momento não é afetado pelo potencial da rede, mas a dependência da energia do momento, tendo como consequência uma variação na massa do elétron. Para tanto observe que da equação (54) temos $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \kappa}$, e como a aceleração é dada por $a = \frac{dv_g}{dt}$, temos então

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E^2}{\partial \kappa \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E d\kappa}{\partial \kappa^2 \partial t}. \quad (58)$$

Substituindo a equação (57) em $d\kappa/dt$ teremos:

$$a = \frac{F}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2}. \quad (59)$$

Da Segunda Lei de Newton $F = m^*a$, assim

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa^2}. \quad (60)$$

O que nos leva a uma nova expressão para a nova massa do elétron em rede cristalina sob ação de um campo externo, onde os portadores de carga se comportam como um elétron livre, porém com uma massa distinta, a massa efetiva dada pela equação (60).

1.6 Confinamento quântico

O confinamento quântico restringe os portadores de carga em uma pequena região do espaço, reduzindo os graus de liberdade do sistema, e influencia diretamente nos níveis de energia permitidos, tornando-os discretos. Para um sistema dito $0D$, os portadores de carga estão confinados nas três direções como acontece em pontos quânticos e temos níveis de energia discretos nas três direções. Em $1D$ os portadores de carga ficam confinados em duas direções, como exemplo temos os fios quânticos, e em $2D$ estão confinados apenas em uma direção e livres no plano como em um poço quântico, onde temos sub-bandas nas direções do confinamento nestes dois últimos casos. Vale ressaltar que observa-se efeitos de quantização da energia no caso dos portadores de carga estarem confinados em uma região de dimensões da ordem do comprimento de onda de de Broglie do portador, dado por:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m^*K_B T}}, \quad (61)$$

onde m^* é a massa efetiva do portador e T a temperatura.

A dimensionalidade depende do número de graus de liberdade D_l e do número de direções de confinamento D_c que obedecem a equação $D_l + D_c = 3$ esses sistemas são chamados de sistemas de baixa dimensionalidade.

Assim, no ponto quântico há confinamento nas três dimensões, ou seja, grau de liberdade zero e um sistema zero dimensional, enquanto que no fio quântico há confinamento em duas direções e no poço quântico o portador está confinado apenas em uma dimensão e livre nas outras duas.

Sendo a energia do portador, quando livre nas três dimensões, dada por

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}, \quad (62)$$

onde $k_{x,y,z}$ são os vetores de onda nas três dimensões, em sistemas bidimensionais, cujo portador é livre no plano, como é o caso de poços quânticos, a energia passa a ser dada por

$$E = E_{x,y} + E_z^n = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} + E_z^n, \quad (63)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, onde o espectro de energia é quantizado somente para o movimento na direção z e contínuo nas outras direções. Então, devido a um potencial unidimensional o movimento do portador de carga no poço quântico se restringe ao plano xy . Analogamente, a energia do fio quântico, onde os portadores são livres apenas na direção x , será

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2)}{2m^*} + E_y^m + E_z^n, \quad (64)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. E por fim, no ponto quântico, temos para a energia a equação

$$E = E_x^l + E_y^m + E_z^n, \quad (65)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$, obtendo o espectro de energia completamente discreto.

Neste trabalho iremos investigar um sistema análogo a um poço de potencial duplo, isto é, o nosso sistema de bicamada, no qual os portadores de carga estão livres em cada um dos planos, pode ser visto como um sistema de dois graus de liberdade, x e y , e confinado em z . Tal formação pode ser obtida, como mencionado anteriormente, ou por heterojunção entre três materiais semicondutores tal que cada interface entre dois semicondutores será responsável pelo surgimento de um gás de elétrons com mobilidade no plano, ou ainda pode ser visto como um sistema de bicamadas formado por dois materiais semicondutores bidimensionais, como por exemplo duas folhas acopladas de dicalcogenetos de metais de transição ou duas folhas de fosforeno.

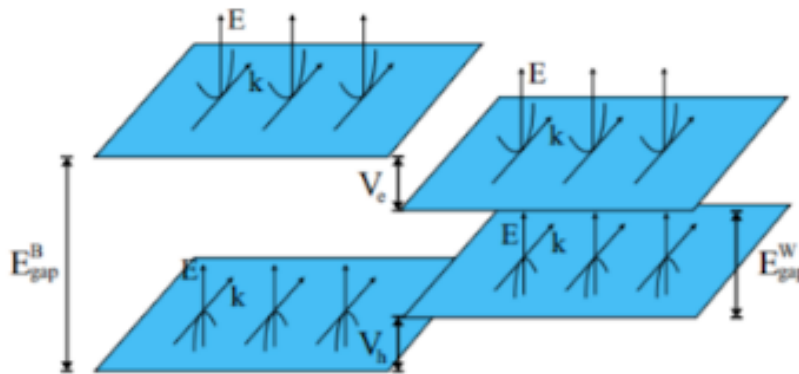


Figura 4: Heteroestrutura.

1.7 Escorpo do trabalho

Baseado nos conhecimentos brevemente discutidos nas seções anteriores do presente capítulo, em especial os conceitos como a aproximação da massa efetiva, bandas de energia e semicondutores, desenvolveremos no Capítulo 2 de forma gradativa, de menor à maior nível de complexidade, o problema de dois níveis formado por dois gases de elétrons acoplados submetidos a campos externos. Analisaremos o comportamento das

duas bandas de energia eletrônicas sob a ação de um campo elétrico fora do plano e um campo magnético no plano e também discutiremos o papel do termo de acoplamento entre os dois planos do gás de elétrons.

No Capítulo 3 apresentaremos as considerações finais e conclusões do trabalho, assim como levantaremos algumas das perspectivas.

2 ESPECTRO DE ENERGIA DE UMA BICAMADA BIDIMENSIONAL DO GÁS DE ELÉTRONS

Neste capítulo iremos analisar analiticamente o espectro de energia em dois gases de elétrons bidimensionais acoplados formado por junções de semicondutores isotrópicos, isto é, cujas massas efetivas são iguais. Estes interagem entre si a partir de Δ . Devido as duas camadas bidimensionais interagirem entre si, os elétrons possuem a probabilidade de encontrarem-se nas duas camadas. Construiremos o problema aumentando gradativamente o nível de dificuldade. Inicialmente consideraremos o caso do campo magnético nulo, submetendo as duas camadas bidimensionais a um potencial diferente de zero, considerando ou não uma interação entre as camadas, como será visto na Seção 2.1. Posteriormente, na Seção 2.2, aplicar um campo magnético no plano dos gases de elétrons, considerando ou não a interação entre as duas camadas. E finalmente tomaremos o problema com a presença simultânea do potencial e do campo magnético aplicados ao sistema. Os gráficos da energia em função do espaço dos momentos k podem ser observados em cada caso.

Vale destacar que o sistema aqui proposto pode ser obtido tanto a partir da junção de dois semicondutores idênticos intercalados por um outro semiconductor, como esquematizado na Fig. (5), ou por exemplo, ao se considerar duas camadas de um material semiconductor bidimensional isotrópico, como por exemplo uma bicamada de grafeno. Em ambos os casos, nota-se uma semelhança com os sistemas largamente estudados no passado formado por dois poços quânticos relativamente próximos para que possam interagir.

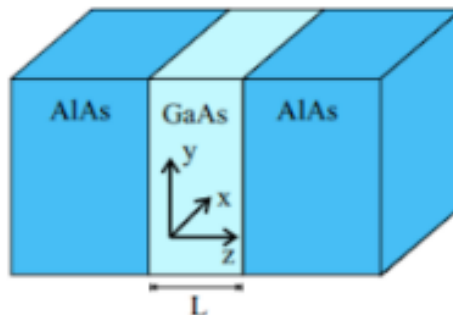


Figura 5: Poço de potencial de uma heteroestrutura.

Neste capítulo, salvo menção explícita em contrário, fica convencionado que todos os vetores serão indicados por letras que identificam a grandeza vetorial e com uma seta sobre ela, enfatizando assim que se trata de fato, de uma grandeza vetorial.

2.1 Na ausência do campo magnético

Vamos considerar o sistema esquematizado na Fig. (6), isto é, um gás de elétrons bidimensional confinado em uma bicamada formada pelos dois planos paralelos

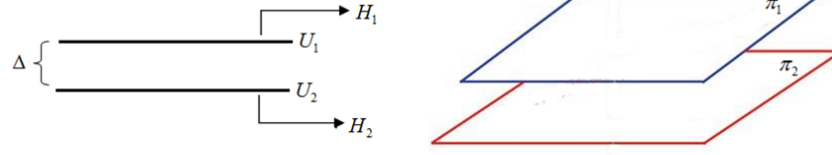


Figura 6: Representação esquemática dos dois planos π_1 e π_2 de gás de elétrons bidimensional acoplados por um termo de energia Δ e submetido a potenciais elétricos U_1 e U_2 , respectivamente.

π_1 e π_2 que interagem entre si com energia de acoplamento Δ , submetidos a um campo elétrico perpendicular aos planos tal que o plano superior e o plano inferior possuem energias U_1 e U_2 .

Sejam H_1 e H_2 os Hamiltonianos para cada planos isolados. Dessa forma, o sistema como um todo pode ser descrito pelo produto direto dos dois subespaços H_1 e H_2 , mais precisamente através do seguinte Hamiltoniano $H = H_1 \otimes H_2$, onde $H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_1$ e $H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_2$ estão no plano superior e inferior respectivamente. Dentro do modelo de elétron único e massa efetiva em cada plano do gás de elétron bidimensional são isotrópicas e idênticas. Assim, obtemos a seguinte matriz.

$$H = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_1 & \Delta \\ \Delta & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_2 \end{bmatrix}, \quad (66)$$

com autovetor dado por $\psi = [\psi_1, \psi_2]^T$, sendo ψ_i a probabilidade de encontrar o elétron na camada i . Como o sistema que estamos resolvendo se trata de um sistema de dois níveis, então a função de onda associada é um pseudospin de duas componentes com cada componente associada a função de onda em cada camada. Resolveremos nas seções seguintes a equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$ a fim de obter as autoenergias E' s, com H dado pela equação (66), do seguinte sistema de equações acopladas

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1 + U_1 \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1, \quad (67a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2 + U_2 \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2. \quad (67b)$$

Como o elétron está livre na direção do plano, então podemos assumir que $\psi_j \rightarrow \psi_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ para $j = 1$ e 2 , sendo o vetor de onda $\vec{k} = (k_x, k_y)$ nas duas direções (x e y) bons números quânticos. Como $\nabla^2 \psi_j = -k^2 \psi_j$, então podemos escrever a equação (67) da seguinte forma:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 \psi_1) + U_1 \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1 \quad (68)$$

ou ainda,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_1\right)\psi_1 + \Delta\psi_2 = E\psi_1 \quad (69)$$

e

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_2\right)\psi_2 + \Delta\psi_1 = E\psi_2 \quad (70)$$

2.1.1 Na ausência do campo elétrico

Primeiramente vamos analisar o caso em que as camadas não estão polarizadas, isto é: $B = 0$ e $U_1 = U_2 = 0$. Pelas equações (69) e (70) temos que

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_1 = -\Delta\psi_2 \quad (71)$$

e

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_2 = -\Delta\psi_1. \quad (72)$$

Desacoplando as equações, substituindo a equação (72) em (71), obtemos:

$$-\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_2 = -\Delta\psi_2 \quad (73)$$

pois $-\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_2 = \psi_1$ ou seja,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)^2\psi_2 = \Delta^2\psi_2 \quad (74)$$

e extraindo a raiz obtemos: $\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_2 = \pm\Delta\psi_2$, ou ainda,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right)\psi_2 \pm \Delta\psi_2 = 0 \quad (75)$$

Mais precisamente,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \Delta - E\right)\psi_2 = 0 \quad (76)$$

Assim, para a solução não trivial, ou seja, para $\psi_2 \neq 0$, obtemos:

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \Delta - E = 0 \quad (77)$$

e portanto, obtemos a seguinte equação para a energia

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \Delta \quad (78)$$

Veja Fig. (7) a representação gráfica da equação (78).

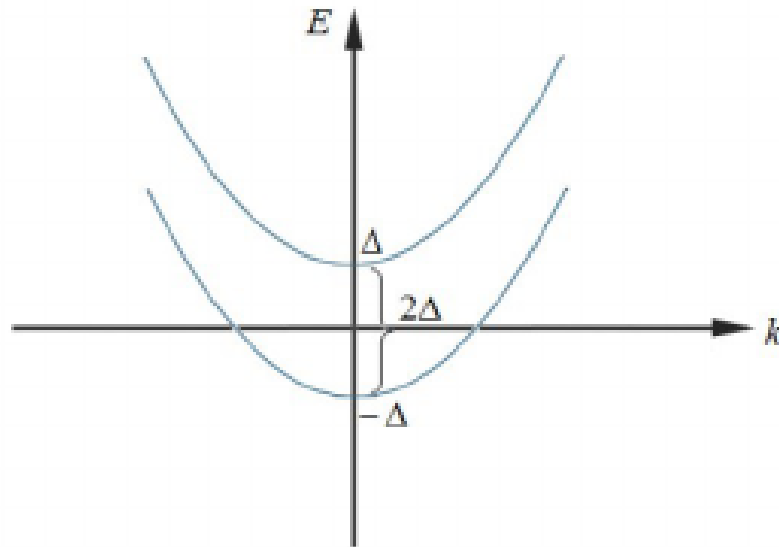


Figura 7: Representação gráfica da energia em função do momento com campo magnético e potenciais elétricos iguais à zero.

Note que para o caso de $\Delta = 0$, obteremos um banda de energia $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ duplamente degenerada que é parabólica com relação ao momento, pois $E \propto k^2$. A Fig. (7) mostra a representação gráfica da equação (78). Pode-se perceber que a introdução do termo de acoplamento Δ entre as camadas quebra a degenerescência de energia, deslocando uma banda de energia para baixo no valor de $-\Delta$ e a outra banda de energia é deslocada para cima com valor de Δ , mas preservando o comportamento parabólico das bandas. Consequentemente o *gap* entre as duas bandas é 2Δ .

2.1.2 Na presença de campo elétrico

Vamos agora supor o efeito de um campo elétrico perpendicular ao plano xy ou mesmo através de algum processo de depagem, tal que o potencial nas camadas 1 e 2 são dados por $U_1 \neq U_2 \neq 0$. No intuito de escrever o Hamiltoniano em uma forma simétrica, vamos introduzir as seguintes constantes

$$U_0 = \frac{U_1 + U_2}{2} \quad \text{e} \quad \delta U = \frac{U_1 - U_2}{2} \quad (79)$$

Então $U_0 + \delta U = \frac{U_1 + U_2}{2} + \frac{U_1 - U_2}{2} = U_1$ e $U_0 - \delta U = \frac{U_1 + U_2}{2} - \frac{U_1 - U_2}{2} = U_2$, ou seja,

$$U_1 = U_0 + \delta U \quad \text{e} \quad U_2 = U_0 - \delta U \quad (80)$$

Como $H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_1$ e $H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_2$, então o Hamiltoniano dado pela equação (66) pode ser reescrito como

$$H = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0 + \delta U & \Delta \\ \Delta & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0 - \delta U \end{bmatrix}, \quad (81)$$

Repetiremos o mesmo procedimento feito na Sec. 2.1.1 para encontrar as autoenergias do sistema no presente caso. Para tal, vamos resolver a equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$, com o Hamiltoniano dado pela Equação (81), o que resulta no seguinte sistema de equações acopladas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + U_0\psi_1 + \delta U\psi_1 + \Delta\psi_2 = E\psi_1 \quad (82)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + U_0\psi_2 - \delta U\psi_2 + \Delta\psi_1 = E\psi_2 \quad (83)$$

No presente caso, assim como o caso anterior visto na Sec. 2.1.1, não existe nenhum termo de potencial externo que quebre a simetria de translação no plano xy , isto é, o elétron está livre nas direções x e y em cada camada. Dessa forma, também podemos assumir aqui soluções do tipo $\psi_j \rightarrow \psi_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Assim, aplicando tal considerações nas equações (82) e (83) obtemos que:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 + \delta U - E\right)\psi_1 = -\Delta\psi_2 \quad (84)$$

e

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - \delta U - E\right)\psi_2 = -\Delta\psi_1 \quad (85)$$

Substituindo a equação (84) na equação (85), obtemos:

$$-\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - \delta U - E\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 + \delta U - E\right)\psi_1 = -\Delta\psi_1 \quad (86)$$

pois $-\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 + \delta U - E\right)\psi_1 = \psi_2$ ou seja,

$$\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - E\right) - \delta U\right] \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - E\right) + \delta U\right]\psi_1 = \Delta^2\psi_1 \quad (87)$$

Como a equação (87) é produto da soma pela diferença, então

$$\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - E\right)^2 - \delta U^2\right]\psi_1 = \Delta^2\psi_1 \quad (88)$$

Assim,

$$\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 - E\right)^2 - \delta U^2 - \Delta^2\right]\psi_1 = 0 \quad (89)$$

Portanto, para a solução não trivial, ou seja $\psi_1 \neq 0$, encontramos para o caso em que $B = 0$ e $U_1 \neq U_2 \neq 0$ a seguinte equação para a energia

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 \pm \sqrt{\delta U^2 + \Delta^2}. \quad (90)$$

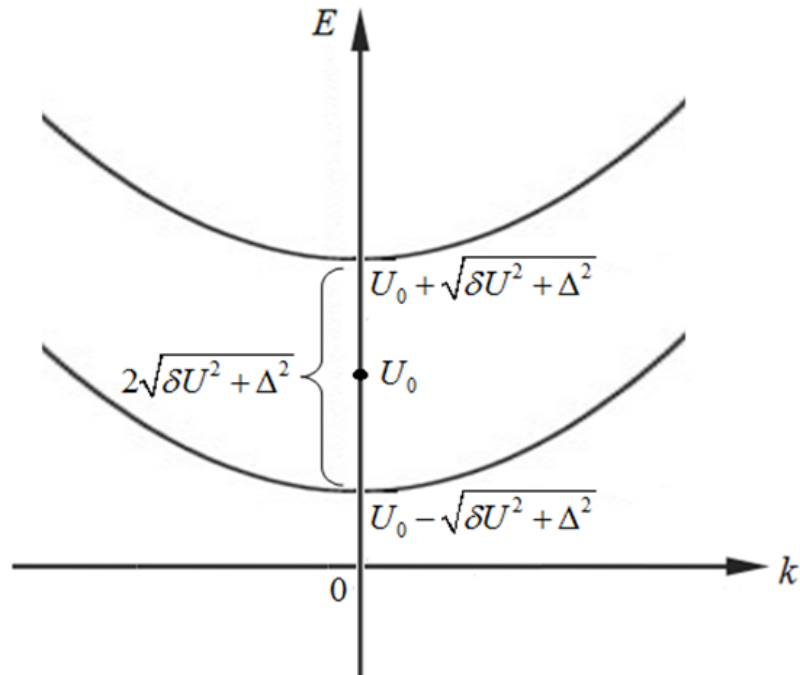


Figura 8: Esboço da energia em função do momento para um sistema formado por uma bicamada de gás de elétrons bidimensional com termo de acoplamento Δ na ausência de campo magnético e na presença de campo elétrico perpendicular ao plano do gás de elétrons bidimensional.

Na Fig. (8) esboçamos o gráfico da equação (90). Comparando as expressões das energias e seus respectivos gráficos para o caso do potencial nulo, $U_1 = U_2 = 0$ [equação (78) - Fig. (7)], e o presente caso na presença de um campo elétrico externo, $U_1 \neq U_2 \neq 0$ [equação (90)- Fig.(8)], pode-se notar que: (i) a relação de dispersão continua sendo parabólica com relação ao momento; (ii) a presença do potencial externo aplicado nas camadas apenas induz um deslocamento como um todo do espectro de energia para o caso sem campo elétrico externo. Fisicamente, esse deslocamento dos níveis de energia leva a uma mudança do valor da energia de Fermi do sistema; e (iii) o *gap* entre as duas bandas é dado por: $2\sqrt{\delta U^2 + \Delta^2}$.

Em particular, vale observar que fazendo $\Delta = 0$ na equação (90), obtém-se que

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_0 \pm \delta U \quad (91)$$

com os níveis de energia separados por um *gap* no valor de $2\delta U$. Como $U_1 = U_0 + \delta U$ e $U_2 = U_0 - \delta U$, então também podemos escrever a expressão (91) das duas bandas

como:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_1 \quad \text{e} \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + U_2 \quad (92)$$

evidenciando o deslocamento energético das bandas de energia de U_1 e de U_2 devido aos potenciais externos aplicados nas camadas 1 e 2, respectivamente, e apresentando um *gap* de $U_1 - U_2 = 2\delta U$ entre as duas bandas. Nesse caso do acoplamento nulo, $\Delta = 0$, e $U_{1,2} \neq 0$ é o campo elétrico o responsável pela quebra de degenerescência dos níveis de energia devido a uma quebra de simetria de inversão do sistema.

2.2 Na presença do campo magnético no plano

Nesta seção vamos investigar os efeitos no espectro de energia devido a aplicação de um campo magnético paralelo aos dois planos da bicamada (xy) no qual o gás de elétrons está confinado. Sem perda de generalidade, vamos considerar que o campo magnético esteja alinhado com o eixo y , isto é $\vec{B} = (0, B, 0)$. Um candidato para o potencial vetor \vec{A} tal que $\vec{\nabla} \times \vec{A} = B\hat{z}$ é o vetor $\vec{A} = (Bz, 0, 0)$, como podemos verificar abaixo:

$$\vec{B} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \times (Bz, 0, 0) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ Bz & 0 & 0 \end{vmatrix} = \frac{\partial}{\partial z}(Bz)\hat{y} - \frac{\partial}{\partial y}(Bz)\hat{z} = B\hat{z} \quad (93)$$

Para incluir o campo magnético vamos considerar a seguinte transformação $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$, onde $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $\vec{k} = -i\vec{\nabla}$ e $\vec{k} = k_x\hat{x} + k_y\hat{y}$ tal que

$$\vec{p} = (p_x - eBz)\hat{x} + p_y\hat{y} \quad (94)$$

Aplicando essa transformação, precisamos verificar como fica o termo quadrático no momento que aparece no Hamiltoniano. Daí temos que

$$p^2 = \vec{p} \cdot \vec{p} \rightarrow (\vec{p} - e\vec{A}) \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) = \vec{p} \cdot \vec{p} - 2e\vec{p} \cdot \vec{A} + e^2\vec{A} \cdot \vec{A} \quad (95)$$

como $\vec{p} \cdot \vec{p} = (\hbar\vec{k}) \cdot (\hbar\vec{k}) = \hbar^2k^2$, $e\vec{p} \cdot \vec{A} = e\hbar\vec{k} \cdot \vec{A} = e\hbar k_x Bz$ e

$$\vec{A} \cdot \vec{A} = (Bz, 0, 0) \cdot (Bz, 0, 0) = B^2z^2 \quad (96)$$

portanto, $p^2 \rightarrow \hbar^2k^2 - 2e\hbar k_x Bz + e^2B^2z^2$, e multiplicando a última expressão por $\frac{1}{2m}$, obtemos:

$$\frac{p^2}{2m} \rightarrow \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x Bz}{m} + \frac{e^2B^2z^2}{2m} \quad (97)$$

Agora, podemos escrever o Hamiltoniano da equação (81) como

$$H = \begin{bmatrix} H_1|_{z=\frac{d}{2}} & \Delta \\ \Delta & H_2|_{z=-\frac{d}{2}} \end{bmatrix} \quad (98)$$

sendo os termos da diagonal principal dados pela equação (97), aplicado nos pontos $z_1 = \frac{d}{2}$ e $z_2 = -\frac{d}{2}$

$$H_1|_{z=\frac{d}{2}} = \frac{p^2}{2m} + U_0 + \delta U = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{ek_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U \quad (99)$$

e

$$H_2|_{z=-\frac{d}{2}} = \frac{p^2}{2m} + U_0 + \delta U = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U. \quad (100)$$

d é a distância entre as duas camadas do gás de elétrons bidimensional. Assim, substituindo os Hamiltonianos nos pontos z_1 e z_2 , obtemos:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U & \Delta \\ \Delta & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U \end{bmatrix} \quad (101)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$, com a função de onda dada pelo pseudospin $\psi = [\psi_1, \psi_2]^T$, obtemos o seguinte sistema de equações acopladas:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U \right) \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1 \quad (102)$$

e

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U \right) \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2 \quad (103)$$

Colocando ψ_1 em evidência na equação (102), obtemos:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U - E \right) \psi_1 = -\Delta \psi_2 \quad (104)$$

Analogamente, da última equação tem-se

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U - E \right) \psi_2 = -\Delta \psi_1 \quad (105)$$

Substituindo a equação (104) em (105), obtemos:

$$A.B = -\Delta \psi_1, \quad (106)$$

onde

$$A = -\frac{1}{\Delta} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U - E \right)$$

e

$$B = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U - E \right) \psi_1,$$

pois $-\frac{1}{\Delta} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e\hbar k_x B d}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U - E \right) \psi_1 = \psi_2$. Assim,

$$C.D = \Delta^2 \psi_1, \quad (107)$$

onde

$$C = \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E \right) + \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right) \right]$$

e

$$D = \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E \right) - \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right) \right] \psi_1.$$

Como a equação (107) é produto da soma pela diferença, então

$$\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E \right)^2 - \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 \right] \psi_1 = \Delta^2 \psi_1 \quad (108)$$

e, portanto, obtemos:

$$\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E \right)^2 - \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 - \Delta^2 \right] \psi_1 = 0 \quad (109)$$

Logo, para a solução não trivial, ou seja $\psi_1 \neq 0$, obtemos:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E \right)^2 = \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 + \Delta^2 \quad (110)$$

e, extraindo a raiz quadrada, obtemos:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 - E = \pm \sqrt{\left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 + \Delta^2} \quad (111)$$

Assim, encontramos a equação da energia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 + \Delta^2} \quad (112)$$

Nas próximas subseções analisaremos alguns casos particulares: (Sec. 2.2.1) quando o momento é não-nulo apenas ao longo da direção \hat{y} e (Sec. 2.2.2) quando o momento é não-nulo apenas ao longo da direção \hat{x} .

2.2.1 Para $\vec{k} = (0, k_y, 0)$

Observe que tomamos $\vec{k} = (0, k_y, 0)$ na equação (112), como $k_x = 0$ então o termo dentro da raiz quadrada será proporcional à k_x será nulo, isto é $\frac{e\hbar k_x B d}{2m} \rightarrow 0$. Logo, a equação (112) torna-se

$$E|_{k_x=0} = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\delta U^2 + \Delta^2} \quad (113)$$

Note que o resultado encontrado na equação (113) é semelhante à equação (90) com apenas um acréscimo de $U_B = \frac{e^2 B^2 d^2}{8m}$ no espectro de energia, ou seja,

$$E|_{k_x=0} = \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + U_0 \pm \sqrt{\delta U^2 + \Delta^2} \right) + U_B \quad (114)$$

onde a contribuição do termo U_B levará a um shift positivo no espectro de energia, uma vez que $U_B > 0$.

2.2.2 Para $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$

Considerando agora que o momento está paralelo ao eixo x , isto é, $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$, temos que a equação (112) resulta em:

$$E|_{k_y=0} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2 + \Delta^2} \quad (115)$$

Analisando alguns casos particulares: (i) Para $B \neq 0$, $U_1 = U_2 = 0$ e $\Delta = 0$ podemos concluir que

$$U_0 = \frac{U_1 + U_2}{2} = 0 \quad \text{e} \quad \delta U = \frac{U_1 - U_2}{2} = 0 \quad (116)$$

e portanto a Eq. (115) fica da seguinte forma:

$$E|_{k_y=U_0=\delta U=\Delta=0} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} \pm \sqrt{\left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} \right)^2} \quad (117)$$

Sabendo que $\sqrt{x^2} = |x|$, então podemos escrever

$$E|_{k_y=U_0=\delta U=\Delta=0} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} \pm \frac{e\hbar |k_x| |B| d}{2m} \quad (118)$$

Colocando $\frac{\hbar^2}{2m}$ em evidência, obtemos

$$E|_{k_y=U_0=\delta U=\Delta=0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + \frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2} \pm \frac{e |k_x| |B| d}{\hbar} \right] \quad (119)$$

Como $\sqrt{k_x^2} = |k_x|$, $\sqrt{\frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2}} = \frac{e|B|d}{2\hbar}$ e $\frac{e|k_x||B|d}{\hbar} = 2|k_x| \frac{e|B|d}{2\hbar}$, então isto mostra que

$$k_x^2 + \frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2} \pm \frac{e|k_x||B|d}{\hbar} \quad (120)$$

é um trinômio quadrado perfeito, e portanto, podemos escrever

$$k_x^2 + \frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2} \pm \frac{e\hbar|k_x||B|d}{\hbar} = \left(|k_x| \pm \frac{e|B|d}{2\hbar} \right)^2 \quad (121)$$

Logo, obtemos a seguinte equação

$$E|_{k_y=U_0=\delta U=\Delta=0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[|k_x| \pm \frac{e|B|d}{2\hbar} \right]^2 \quad (122)$$

Observe que o termo $\frac{e|B|d}{2\hbar}$ representa uma translação no sentido positivo e negativo na coordenada k_x das energias parabólicas, como apresentado na Fig. ???, quebrando assim a degenerescências das bandas de energia, exceto no ponto $k_x = 0$. Isso mostra que tal deslocamento ainda preserva a simetria de espelho dos níveis de energia com respeito ao eixo $k_x = 0$. A energia correspondente ao ponto de degenerescência é $E_{deg} = E(k_x = 0) = \frac{e^2 B^2 d^2}{8m}$. É importante notar que as isoenergias são dois círculos separados para baixas energias, isto é, para $E < E_{deg}$, centrados em $k_x = \frac{e|B|d}{2\hbar}$ e em $k_x = -\frac{e|B|d}{2\hbar}$. Enquanto que para altas energias com $E > E_{deg}$, as isoenergias têm a aparência de um “amendoim”.

(ii) Para $B \neq 0$, $U_1 \neq 0$, $U_2 \neq 0$ e $\Delta = 0$ obtemos a partir da equação (115),

$$E|_{k_y=\Delta=0} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right)^2} \quad (123)$$

observando $\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U > 0$, então obtemos:

$$E|_{k_y=\Delta=0} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \left(\frac{e\hbar k_x B d}{2m} - \delta U \right) \quad (124)$$

Colocando $\frac{\hbar^2}{2m}$ em evidência, obtemos

$$E|_{k_y=\Delta=0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + \frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2} \pm \frac{e\hbar k_x B d}{\hbar} \right] + U_0 \mp \delta U \quad (125)$$

Como $k_x^2 + \frac{e^2 B^2 d^2}{4\hbar^2} \pm \frac{e\hbar k_x B d}{\hbar} = \left[k_x \pm \frac{eBd}{\hbar} \right]^2$, então obtemos a seguinte equação

$$E|_{k_y=\Delta=0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x \pm \frac{eBd}{\hbar} \right]^2 + U_0 \mp \delta U \quad (126)$$

Vale notar que nesse caso, o ponto de cruzamento das duas bandas na coordenada k_x não

é mais no $k_x = 0$ e sim

$$k_x = \frac{2\delta U m}{eB\hbar d}$$

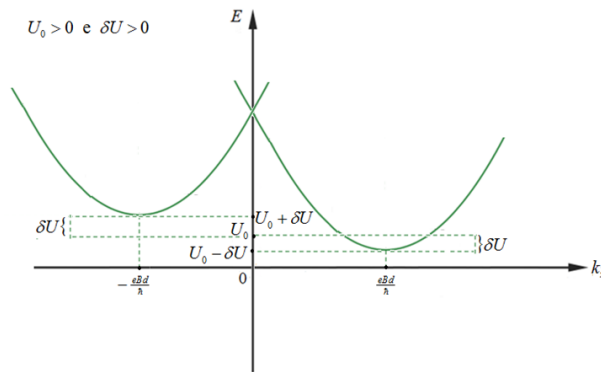


Figura 9: Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 e δU maiores que zero.

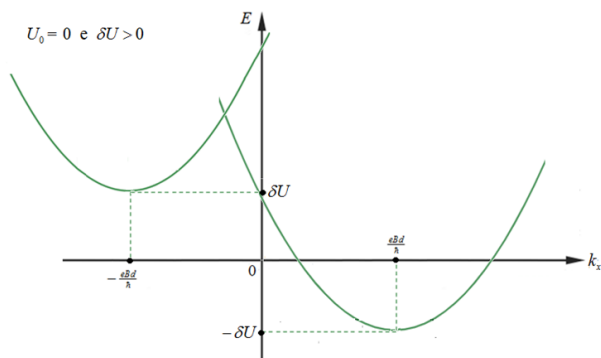


Figura 10: Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 igual a zero e δU maior que zero.

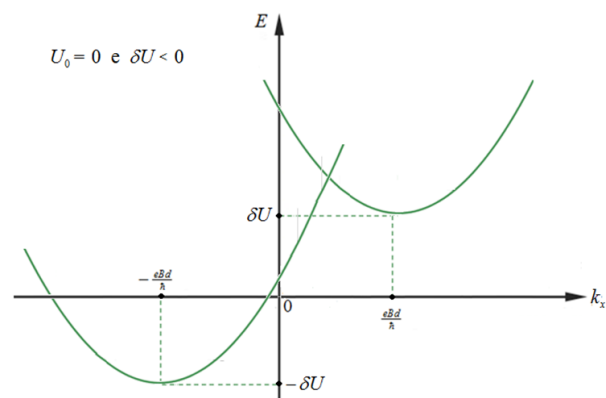


Figura 11: Representação gráfica da energia em função do momento para uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano para U_0 igual a zero e δU menor que zero.

3 CONCLUSÃO

Através da investigação analítica desenvolvidas nesta dissertação sobre as propriedades eletrônicas de uma bicamada de gás de elétrons bidimensional submetida a um campo elétrico perpendicular ao plano e um campo magnético paralelo ao plano, foi possível mostrar que: (i) o termo de energia de acoplamento entre as camadas quebra a degenerescência dos estados; (ii) a presença de um campo magnético no plano causa uma mudança transversal linear no momento. Ou seja, os níveis de energia correspondentes a diferentes camadas do gás bidimensional são deslocados em direções opostas no espaço dos momentos, o que leva ao cruzamento e ao anticruzamento das curvas de dispersão de energia quando o termo de acoplamento é ou não levado em consideração; (iii) na presença de campos elétricos e magnéticos, pôde-se observar uma distorção dos dois ramos de energia com a formação de uma estrutura de dois vales com diferentes superfícies de Fermi, como já era previsto. Tendo em vista o grande interesse da comunidade científica em materiais semicondutores anisotrópicos como por exemplo, o fósforo negro, e em sistemas formado por camadas não alinhadas temos também como exemplo a bicamada de grafeno rotacionada, trabalhos futuros podem, além do caso isotrópico abordado neste trabalho, comparar as estruturas de bandas entre o caso isotrópico e o anisotrópico. Ou ainda pode ser investigado o efeito no espectro de energia devido a rotação de uma camada do gás de elétrons em relação à outra, para os casos isotrópico e anisotrópico.

REFERÊNCIAS

- [1] OLIVEIRA, I. S.; JESUS, V. L. B. **Introdução à Física do Estado Sólido** - 1.ed. - São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.
- [2] SOARES, A. G. **Magneto-transporte em sistemas semicondutores com gás de elétrons bidimensional**. 1994. 61 f. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP. Disponível em: <http://www.repositorio.unicamp.br/handle/REPOSIP/277733>. Acesso em: 20 jul. 2018
- [3] BRANT, J. C. **Estudo de Interferência de Elétrons em Dispositivos Mesoscópicos no Regime Hall Quântico** . 2006. Dissertação (mestrado) - UFMG , Belo Horizonte, 2006.
- [4] SOUTO, E. S. **Propriedades de spintronica dogas de elétrons e dinâmica do íon mn e nano estruturas semicondutoras Magnéticas**. Tese (Doutorado) - Universidade de brasilia.
- [5] DIAS, I.F.L. **Novos materiais e estruturas semicondutoras**. Semina, v. 12, n. 4, p.265-274, dez. 1991.
- [6] CAVALHEIRO, A. **O efeito fotocondutivo e a estrutura eletrônica de poços quânticos de Ga As/InGaAs/GaAs com dopagem planar na barreira**. São Paulo, 2001. Tese (Doutorado). Universidade de São Paulo.
- [7] KITTEL, C. **Introdução à física do estado sólido**. - 8. ed. - Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [8] GROSSO, G.; PARRAVICINI, G. P. **Solid state physics**. San Diego: Academic Press, 2003.
- [9] SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. Revised Edition. Masachusetts: Addisson-Wesley Publising Company, 1994.
- [10] HARRISON, P. **Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Comptational Physics of Semiconductor Nanostructures**. - 2. ed.
- [11] LIBROFF, R. L. **Introductory quantum mechanics**. 4th edition. San Francisco: Addison Wesley Publishing Company, 2003.
- [12] RESENDE, S. M. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**. - 4. ed. - São Paulo: Editora Livraria da Física, 2015.
- [13] ASHCROFT, N. W.; MERMIN N. D. **Solid State Physics**. Brooks Cole, 1 edition, 1976.

- [14] JÚNIOR, F. F. B. **Propriedades Termodinâmicas, Eletrônicas e de Transporte de Sistemas Curvos Semicondutores**. Tese (Doutorado), Departamento de Física, UFC, Fortaleza, 2014.
- [15] COSTA, D. R. **Anéis quânticos semicondutores ideais**. Dissertação (Mestrado), Departamento de Física, UFC, Fortaleza, 2011.
- [16] CUNHA, S. M. **Propriedades eletrônicas de fios quânticos de semicondutores anisotrópicos e dinâmica de pacotes de onda em monocamada de fósforo negro**. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2017.
- [17] CHAVES, A. **Confinamento em Fios Quânticos Semicondutores**. Dissertação (Mestrado), Departamento de Física, UFC, Fortaleza, 2007.
- [18] BARBIER, M. **Transport properties of nanostructures and superlattices on single-layer and bilayer graphene**. PhD thesis, 2012.
- [19] LENARCIC, Z. **Landau levels in graphene**. Universidade de Liubliana, 2010.
- [20] ALVES, T. F. A. **Propriedades Físicas de um Gás de Elétrons 2D na Presença de um Campo Magnético Inclinado**. Fortaleza, 2008. Tese (Doutorado). Universidade Federal do Ceará.
- [21] HUANG, D.; LYO, S. K. **Photoluminescence spectra of n-doped double quantum wells in a parallel magnetic field**. Physical Review B, Volume 59, Number 11, 15 March 1999-I