

Francisco Florêncio Batista Júnior

*Propriedades Termodinâmicas, Eletrônicas
e de Transporte de Sistemas Curvos
Semicondutores*

Fortaleza – CE

Julho / 2014

Francisco Florêncio Batista Júnior

*Propriedades Termodinâmicas, Eletrônicas
e de Transporte de Sistemas Curvos
Semicondutores*

Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Co-orientador:

Prof. Dr. Andrey Chaves

DOUTORADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

Julho / 2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca do Curso de Física

B337p Batista Júnior, Francisco Florêncio

Propriedades Termodinâmicas, Eletrônicas e de Transporte de Sistemas
Curvos Semicondutores / Francisco Florêncio Batista Júnior. – Fortaleza,
2014.

92 f.: il., enc.; 30 cm.

Tese (doutorado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,
Departamento de Física, Fortaleza, 2014.

Orientadora: Prof. Dr. Gil de Aquino Farias.

1. Semicondutores. 2. Sistemas Curvos. 3. Propriedades Termodinâmicas.
4. Propriedades de Transporte. I. Título.

CDD 621.38152

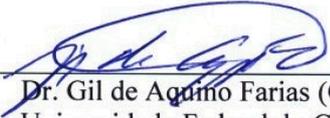
FRANCISCO FLORÊNCIO BATISTA JÚNIOR

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS, ELETRÔNICAS E DE TRANSPORTE
DE SISTEMAS CURVOS SEMICONDUTORES**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 29 / 07 / 2014.

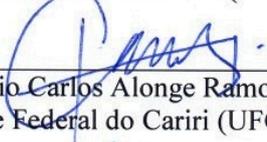
BANCA EXAMINADORA



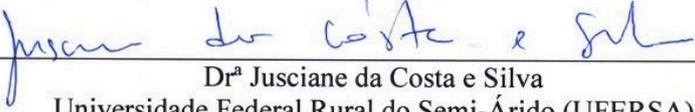
Dr. Gil de Aquino Farias (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)



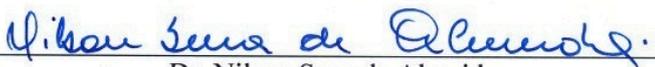
Dr. Andrey Chaves (Coorientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)



Dr. Antônio Carlos Alonge Ramos
Universidade Federal do Cariri (UFCA)



Drª Jusciane da Costa e Silva
Universidade Federal Rural do Semi-Árido (UFERSA)



Dr. Nilson Sena de Almeida
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte (UERN)

À minha esposa.

Agradecimentos

- Agradeço a Deus e a minha família pelo apoio constante desde o início.
- Agradeço ao professor Gil pela ajuda, conselhos e esforço em concluirmos este trabalho.
- Ao professor Nilson pelas discussões sobre os problemas aqui abordados e por toda a ajuda.
- Agradeço também ao professor Andrey pelas discussões e pelo apoio para a conclusão desta tese.
- Aos professores Felipe e Peeters pelas discussões e pelas conversas esclarecedoras.
- A todos os amigos de laboratório e de departamento que estiveram presentes nesse período de trabalho e que me ajudaram direta ou indiretamente.
- Ao CNPq pelo apoio financeiro.

“Nunca é alto o preço a pagar pelo privilégio de pertencer a si mesmo.”

Nietzsche

Resumo

Neste trabalho estudamos propriedades termodinâmicas de um gás de elétrons confinado em uma superfície bidimensional cilíndrica sob a ação de um campo magnético perpendicular ao eixo do cilindro. Observamos que o campo magnético aplicado desta forma produz efeito similar ao produzido por um campo magnético não-homogêneo em um sistema plano. Calculamos o espectro de energia nesse sistema para diferentes valores de curvatura e simetria do campo com a superfície. Mostramos que as propriedades físicas desses sistemas estão fortemente ligadas a essa simetria do campo magnético através do cálculo da densidade de estados, potencial químico e calor específico do sistema.

Investigamos como a curvatura de um filme semicondutor afeta suas propriedades eletrônicas e de transporte. Estudamos como o potencial efetivo induzido pelas deformações de curvatura periódicas no filme modificam sua estrutura de bandas induzindo o confinamento eletrônico. Para parâmetros fixos de curvatura, tal confinamento pode ser ajustado através de um campo elétrico externo, de modo que certas características da estrutura de bandas tais como *gaps* de energia e curvaturas das bandas podem ser controladas por um parâmetro externo. Também mostramos que, para alguns valores de curvatura e campo elétrico, é possível obter bandas de Dirac para filmes semicondutores com curvatura Gaussiana. Além disso, usamos um método de propagação de pacotes de onda para demonstrar que as curvaturas são responsáveis por significantes transições entre sub-bandas, especialmente para valores moderados de curvatura.

Abstract

We study thermodynamic properties of an electron gas confined in a two-dimensional cylindrical surface under the action of a magnetic field perpendicular to the cylinder axis. We observed that the applied magnetic field has a similar effect to that produced by a non-homogeneous magnetic field on a flat system. We calculate the energy spectrum of the system for different values of curvature and symmetry of the magnetic field to the surface. We show that the physical properties of these systems are strongly connected to the symmetry imposed by the magnetic field by calculating the density of states, specific heat and chemical potential.

We investigate how the curvature of a semiconductor film affects its electronic and transport properties. We study how the geometry-induced potential resulting exclusively from periodic ripples in the film modifies its band structure by inducing electronic confinement. For fixed curvature parameters, this confinement can be easily tuned by an external electric field, so that features of the band structure such as the energy gaps and band curvature can be controlled by an external parameter. We also show that, for some values of curvature and electric field, it is possible to obtain massless Dirac bands for a smooth structure. Moreover, we use a wave packet propagation method to demonstrate that the ripples are responsible for a significant inter-sub-band transition, specially for moderate values of the ripple height.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 15
1.1	Filmes e Estruturas Semicondutoras Curvas	p. 16
1.2	Definição e importância dos semicondutores	p. 22
1.3	Elétrons em Cristais	p. 23
1.4	Confinamento Quântico	p. 31
1.5	Níveis de Landau	p. 32
1.6	Densidade de Estados (DOS)	p. 34
1.7	Energia de Fermi	p. 35
1.8	Sumário	p. 36
2	Propriedades Termodinâmicas de um Gás de Elétrons em uma Superfície Curva	p. 38
2.1	Introdução	p. 38
2.2	O Espectro de Energia	p. 40
2.3	Densidade de Estados, Potencial Químico e Calor Específico	p. 48
3	Propriedades Eletrônicas e de Transporte de Filmes Semicondutores com Deformações de Curvatura	p. 58
3.1	Modelo Teórico	p. 58
3.2	Propriedades Eletrônicas	p. 60
3.2.1	Método de Diferenças Finitas	p. 61

3.3	Propriedades de Transporte	p. 63
3.3.1	O Método Split-Operator	p. 65
3.3.2	Corrente de Probabilidade, Transmissão e Reflexão	p. 67
3.3.3	Condições de Contorno	p. 67
3.3.4	Obtendo Auto-Estados Através do Método Split-Operator	p. 68
3.4	Resultados e Discussões	p. 69
3.4.1	Estrutura de Bandas	p. 70
3.4.2	Probabilidade de transmissão e espalhamento em sub-bandas	p. 78
4	Conclusões e Perspectivas	p. 82
5	Apêndice A - Artigos Publicados, Submetidos e Aceitos	p. 84
6	Apêndice B - Potencial de Curvatura de uma Partícula Confinada em uma Superfície Curvilínia	p. 85
	Referências	p. 90

Lista de Figuras

- 1 Passo-a-passo do processo de fabricação de uma estrutura curva utilizada por Lorke *et al.*: alguns elementos do circuito são definidos (a) e (b), deposita-se a estrutura da barra Hall sobre o circuito (c) e em seguida uma camada para auxiliar no transporte da estrutura (d) no passo seguinte, onde a estrutura é posta sobre um cilindro de vidro (e). A estrutura final é mostrada na imagem (f) [16]. p. 17
- 2 Geometria tubular (a) e várias outras estruturas (b) fabricadas usando o strain como principal veículo de criação da curvatura [18]. p. 18
- 3 Formação de nanotubos usando um método mais geral (a) e um outro mais específico (b) (veja o texto). As figuras (c) e (d) mostram nanotubos formados pelo primeiro método e a figura (e) mostra um nanotubo formado pelo segundo método [21]. p. 19
- 4 Imagens ópticas em falsa cor de um transistor de efeito de campo *back-gate* com diferentes espessuras de multicamadas de MoS₂ como canal. [22] p. 20
- 5 Representação esquemática (a) da estrutura molecular do cristal bidimensional, (b) de um nanofilme crescido com camadas verticais sobre um substrato plano e (c) sobre um substrato curvo. [5] p. 21
- 6 Imagem de microscopia eletrônica de transmissão da seção reta de um sistema conhecido como *v-groove*, que são camadas curvas que formam canais com o formato de um ‘V’. A distribuição de carga é mostrada esquematicamente na figura. [23, 24]. p. 22
- 7 Variação do potencial idealizado pelo modelo de Kronig-Penney. [25] . . p. 25
- 8 Representação gráfica da solução para $\varepsilon = \varepsilon(k)$ para o modelo de Kronig-Penney. À esquerda vemos a curva representando o lado esquerdo $f(\alpha a)$ da Eq.1.17 e à direita vemos a representação de $f(ka)$, o lado direito da Eq.1.17 [25]. p. 27

9	Curva de ε versus k para o modelo de Kronig-Penney [25].	p. 27
10	Confinamento das heteroestruturas em relação à dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e suas respectivas densidades de estados.	p. 32
11	Espectro de energia de um elétron na presença de um campo magnético confinado em um sistema 2D e 3D.	p. 34
12	Densidade de estados por unidade de área de um elétron confinado em um sistema 2D sob um campo magnético perpendicular.	p. 35
13	Níveis de Landau e a energia de Fermi como função do campo magnético.	p. 36
14	Representação geométrica da superfície cilíndrica S e dos parâmetros usados para descrevê-la.	p. 40
15	Perfil da estrutura formada pela superfície S depositada sobre um tubo cilíndrico para diferentes valores de q_B , que é definido como o ponto ao longo de q_1 em que o campo magnético corta perpendicularmente a superfície S . Nas situações em que a superfície está mais assimétrica em relação ao campo magnético \vec{B} , $q_B = 0$, L_x e no caso simétrico, $q_B = 0.5L_x$	p. 41
16	Vista superior da estrutura formada pela superfície S depositada sobre um tubo cilíndrico. A figura mostra as trajetórias clássicas de um elétron confinado na superfície curva sob a ação de um campo magnético com uma intensidade tal que o diâmetro da órbita ciclotrônica seja menor que a largura L_x . Em (a), vemos o comportamento do elétron livre de confinamento nas bordas; em (b) o elétron está confinado na superfície S e o campo está alinhado simetricamente em relação à mesma ($q_B = 0.5L_x$); em (c) e (d), temos a mesma situação de (b), mas para uma inclinação intermediária de campo $0 < q_B < 0.5L_x$ e uma situação mais assimétrica $q_B = 0$, respectivamente.	p. 44
17	Potenciais efetivos para $k_2 = 0$ calculados em um sistema assimétrico (a) e simétrico (b) para diferentes valores de campo magnético.	p. 46

18	Gráficos polares das funções de onda $ \varphi_1 ^2$ do estado fundamental e $ \varphi_2 ^2$ do primeiro estado excitado para campos magnéticos $B_3 = 0.02, 0.2$ e 2 T nos casos assimétricos (linhas sólida e pontilhada) e simétrico (linha tracejada).	p. 47
19	Densidade de estados (em unidades arbitrárias) para o gás de elétrons em uma faixa cilíndrica de raio $R = 1.0 \mu\text{m}$ na presença de um campo magnético $B_3 = 2T$ variando com a inclinação do campo magnético com relação à superfície $q_B/L_x = 0.0, 0.25$ e 0.5 para larguras $L_x = 0.3 \mu\text{m}$ (a) e $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ (b). Os estados que surgem entre os picos do caso simétrico são consequência da assimetria introduzida pelo campo magnético.	p. 50
20	Curvas de potencial químico variando com o raio R e com a temperatura T para uma faixa cilíndrica de largura $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ com $B_3 = 2$ T nos casos em que o campo magnético é assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.	p. 53
21	Curvas de potencial químico para uma faixa curva de raio $R = 1 \mu\text{m}$ e com $L_x = 0.4 \mu\text{m}$, variando com a temperatura T e com B_3 para os casos em que o campo magnético é assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.	p. 54
22	(a) Curvas de $\text{sech}^2[(E - \mu)/2k_B T]$ para $R = 1 \mu\text{m}$ nos casos em que a superfície está assimétrica (a) e simétrica (b) em relação ao campo magnético aplicado.	p. 55
23	Curvas de calor específico variando com o raio R e com a temperatura T para uma faixa curva de largura $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ com $B_3 = 2$ T, nos casos em que o campo magnético está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.	p. 56
24	Curvas de calor específico para uma faixa curva de raio $R = 1 \mu\text{m}$ e com $L_x = 0.4 \mu\text{m}$, variando com T e B_3 nos casos em que o campo magnético está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.	p. 57

25	Esboço dos filmes curvos abrupto (a) e suave (b) de largura w sob investigação, com raio R e amplitude α , respectivamente. O potencial geométrico efetivo devido à curvatura é mostrado em (c) para as estruturas abrupta (linha tracejada) e suave (linha sólida), onde os valores mínimos $V_0 = -\hbar^2/8m_eR^2$, $V_1 = -\hbar^2\kappa(0)^2/8m_e$ e $\kappa(x)$ é a curvatura dependente de x da estrutura suave. As setas tracejadas em $x = \pm R$ representam a descontinuidade no potencial efetivo devido à curvatura para o caso abrupto.	p. 59
26	Bandas de energia para um elétron livre na direção x e confinado na direção y , com energia cinética média inicial ε_i . No estado fundamental ($n = 1$), isto equivale a um elétron que se move com vetor de onda $k_x = k_1$ (ou $k_x = -k_1$), podendo ser espalhado para outras sub-bandas de energia, como $n = 2$, onde o vetor de onda $k_x = \pm k_2$ ou $n = 3$, com $k_x = \pm k_3$	p. 64
27	Estrutura de bandas e densidade de estados para filmes curvos, considerando (a) diferentes valores de raio do filme circular e (b) diferentes alturas do filme suave.	p. 70
28	Gráficos de contorno do módulo quadrado das funções de onda do estado fundamental em $k_x = 0$ sem um campo elétrico aplicado considerando (a) um filme plano e (b) um filme com curvatura abrupta de raio $R = 60 \text{ \AA}$. Em (c) em em (d), vemos os mesmos tipos de curvas do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente, para o caso em que a estrutura tem uma curvatura suave em forma de uma Gaussiana de largura $\Gamma = 130 \text{ \AA}$ e amplitude $\alpha = 140 \text{ \AA}$	p. 72
29	Os mesmos gráficos da Fig.28 para um campo elétrico $F = 20 \text{ kV/cm}$ aplicado na direção positiva de y	p. 74
30	Estrutura de bandas (à esquerda) e densidade de estados (à direita) para filmes curvos (a) abrupto e (b) suave, considerando diferentes valores de campo elétrico externo.	p. 75

- 31 Diferenças entre: (a) o primeiro e o segundo níveis de energia $E_2 - E_1$ em um valor mínimo do vetor de onda $k_x = k_{min}$ na primeira zona de Brillouin, (b) o segundo e o terceiro níveis de energia $E_3 - E_2$ em $k_x = 0$ e (c) o quarto e o quinto níveis $E_4 - E_3$ em $k_x = k_{min}$ como função do campo elétrico F aplicado para diferentes valores de raio R e amplitude α . p. 76
- 32 Probabilidades de transmissão como função (a) do raio de um filme circular e (d) da amplitude do filme com curvatura suave, para os casos abrupto (I) e suave (II), respectivamente. As contribuições dos estados na primeira ((b) e (e)) e segunda ((c) e (f)) sub-bandas para a probabilidade de transmissão também são mostradas na figura. p. 78
- 33 Imagens capturadas do pacote de onda em quatro diferentes instantes de tempo t para $\varepsilon_i = 280$ meV sendo espalhado pelas curvas abruptas (painéis superiores) para $R = 30 \text{ \AA}$ (a), 140 \AA (b) e suaves (painéis inferiores) para $\alpha = 30 \text{ \AA}$ (c), 140 \AA (d). p. 80
- 34 Sistema de coordenadas curvilíneas sobre a superfície de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$ p. 85
- 35 Seção reta C de uma superfície encurvada em torno de um cilindro de raio a . O ponto médio A foi escolhido como a origem do arco s p. 89

1 *Introdução*

O interesse em propriedades eletrônicas de sistemas quânticos com simetria cilíndrica recebeu um grande impulso desde a proposta da utilização dos nanotubos [1, 2] como elementos para construção de dispositivos nanoeletrônicos, explorando suas propriedades mecânicas e elétricas [3, 4]. Recentemente, surgiram novos sistemas semicondutores em que portadores são confinados em superfícies curvas, e com isso apresentaram-se novas possibilidades, inclusive o fato de podermos obter um gás de elétrons 2D (2DEG) com uma simetria cilíndrica (C2DEG), enriquecendo ainda mais este ramo da Física com suas aplicações em nanoestruturas semicondutoras.

Nos últimos anos, um novo tipo de tecnologia em semicondutores para futuras aplicações em computação foi desenvolvida, a qual é baseada em nanocristais bidimensionais fabricados em camadas com menos de $1\ \eta\text{m}$ de espessura, os quais podem substituir os transistores usados atualmente. A estrutura em camadas é formada por um material chamado dissulfeto de molibdênio, o qual pertence a uma nova classe de semicondutores – dicalcogeneto de metal – que surge como um candidato em potencial para substituir a tecnologia atual, o semicondutor metal-óxido complementar (CMOS). [5]

Além disso, experimentos recentes têm demonstrado a possibilidade de obter-se filmes finos semicondutores flexíveis, tais como o trabalho de R. Alston *et al*, o qual investiga alguns efeitos em transistores de filmes finos semicondutores formados por óxidos amorfos, os quais são flexíveis e possuem aplicações na eletrônica [6]; também podemos citar o trabalho de Y. H. Kim *et al*, o qual estuda um método geral para a formação de semicondutores de metal-óxido de alta performance e operacionalmente estáveis à temperatura ambiente [7]; e por último o trabalho de K. Nomura *et al*, o qual consiste em um método de fabricação de transistores de filmes finos flexíveis transparentes [8]. Estes trabalhos renovaram o interesse em investigarmos o confinamento quântico e as propriedades eletrônicas em superfícies curvas.

Neste Capítulo introdutório fazemos uma breve explanação sobre filmes e estruturas

semicondutoras curvas, abordando alguns trabalhos experimentais realizados, os quais servem de motivação e criamos um embasamento teórico para cada assunto que será estudado no trabalho, incluindo uma breve introdução sobre semicondutores, abordando temas como estrutura de bandas, aproximação de massa efetiva e confinamento quântico.

1.1 Filmes e Estruturas Semicondutoras Curvas

Do final dos anos 1960 ao início dos anos 1970 foi descoberto que sistemas eletrônicos em interfaces semicondutoras têm propriedades ópticas e de transporte únicas, devido à sua natureza *bidimensional* [9–11]. Desde então (com apenas algumas exceções), o termo “bidimensional” implica que esses sistemas eletrônicos eram necessariamente planos. Isto parece ser natural, considerando que os gases de elétrons bidimensionais (2DEGs) são produzidos em interfaces suaves, em escala quase atômica de semicondutores monocristalinos. Matematicamente, entretanto, sistemas bidimensionais podem ser curvos e, de fato, um dos primeiros tratamentos teóricos do efeito Hall quântico em 2DEG usa uma geometria cilíndrica como ponto de partida [12].

Experimentalmente, uma geometria não-plana é difícil de ser produzida, e somente nas últimas décadas é que trabalhos relacionados com 2DEG de topologia complexa foram publicados [13–15]. O primeiro passo para criar um sistema eletrônico não-plano envolve o confinamento de um gás de elétrons bidimensional (2DEG) em uma geometria curva cilíndrica. Lorke *et al.* mostraram que uma barra Hall plana, formada por um filme fino heteroestruturado contendo o 2DEG de alta mobilidade, pode ser transferida a partir de um substrato de suporte para uma geometria curva usando a técnica de *decolagem epitaxial* (epitaxial lift-off) [16]. Devido à flexibilidade do filme fino, é possível produzir um gás de elétrons bidimensional curvo (C2DEG). A Fig.1 mostra esquematicamente os passos deste processo. Usando litografia óptica padrão, primeiro a fonte, o dreno e os contatos de prova são definidos (Fig.1(a)). Depois, um eletrodo de 20 nm de largura é evaporado (Fig.1(b)). A estrutura da barra Hall que terá geometria cilíndrica é depositada no passo seguinte (Fig.1(c)). Uma camada protetora de cera de algumas centenas de micrômetros é também depositada sobre o conjunto, para auxiliar no processo de transferência da barra Hall para a estrutura curva, protegendo a estrutura (Fig.1(d)). A camada de cera é então removida e o filme semicondutor, extremamente frágil, é transferido para um pequeno tubo de vidro com diâmetro da ordem de 1 mm (Fig.1(e)). Uma fotografia do processo final pode ser vista na Fig.1(f). Os detalhes deste processo podem ser vistos em [17]. Uma das vantagens deste método é que se podem criar estruturas com vários tipos diferentes

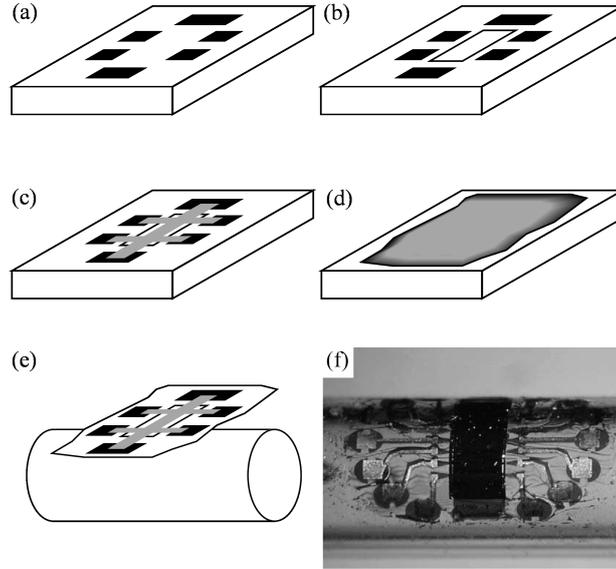


Figura 1: Passo-a-passo do processo de fabricação de uma estrutura curva utilizada por Lorke *et al.*: alguns elementos do circuito são definidos (a) e (b), deposita-se a estrutura da barra Hall sobre o circuito (c) e em seguida uma camada para auxiliar no transporte da estrutura (d) no passo seguinte, onde a estrutura é posta sobre um cilindro de vidro (e). A estrutura final é mostrada na imagem (f) [16].

de topologia, devendo-se apenas modificar o formato do tubo de vidro usado como base para receber o filme fino.

Com o intuito de fabricar e examinar o transporte eletrônico em uma geometria tubular de baixa dimensionalidade, com diâmetros da ordem de nanômetros ou micrômetros, Shaji *et al.* fizeram uso do próprio *strain* existente no material para a criação de heteroestruturas [18]. Em geral, quando duas redes semicondutoras com parâmetros de rede incompatíveis são crescidas camada por camada epitaxialmente, o *strain* é gerado à medida que a camada tenta alinhar sua rede com a rede do substrato subjacente. Foi mostrado que, nesse caso, a bicamada tende a encurvar-se na direção da camada de menor parâmetro de rede, formando uma geometria tubular mostrada na Fig.2(a) [19, 20]. A Fig.2(b) mostra a imagem de várias geometrias fabricadas através dessa técnica: (i) tubos de uma única volta, (ii) tubos com várias voltas e (iii) tubos helicoidais. Incorporar um *strain* maior e um 2DEG de maior mobilidade em tais sistemas faz com que essas estruturas tubulares de baixa dimensionalidade sejam fabricadas com diâmetros ainda menores.

Prinz *et al.* mostraram que nanotubos podem ser formados a partir de filmes finos

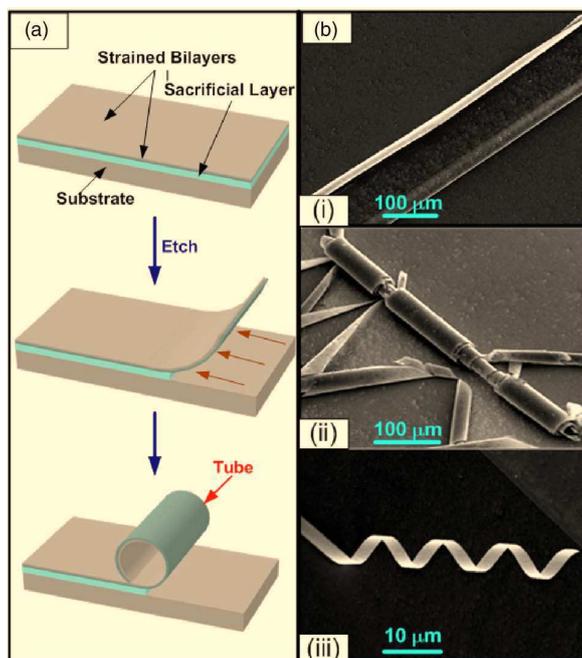


Figura 2: Geometria tubular (a) e várias outras estruturas (b) fabricadas usando o strain como principal veículo de criação da curvatura [18].

sólidos de diferentes materiais em quase qualquer posição, uma vez que eles são liberados dos substratos [21]. Essa flexibilidade excepcional tem implicações úteis, incluindo transporte de fluidos e capilaridade em escala nanométrica, bem como a investigação fundamental sobre uma nova diversidade de materiais e geometrias. Existem dois métodos para a criação desses nanotubos, envolvendo um método ‘geral’ e outro ‘especializado’. Ambos dependem de como as finas camadas do material se desprendem do substrato através de um procedimento de remoção seletiva. A posição dos nanotubos é exatamente determinada pelo tempo de remoção. O controle da espessura das camadas e, consequentemente, das paredes do tubo depende do método de deposição, e sua precisão pode chegar a escalas atômicas. A Fig.3 mostra a formação desses nanotubos de estado sólido.

No método mais geral, mostrado na Fig.3(a) (método I), um material sensível à remoção é depositado na superfície de um substrato. No topo dessa camada sacrificada, um filme fino (ou uma série de filmes finos) é depositado. Depois de uma remoção seletiva da camada sacrificada, a fina camada superior é enrolada e dobrada para trás sobre a superfície da amostra, prendendo-se a si mesma. Na posição onde a camada é dobrada, forma-se um nanotubo. Existe também um método especializado, mostrado na Fig.3(b) (método II) para criar os nanotubos. A sequência de camadas consiste de um material sensível à remoção, seguida por uma bicamada de dois diferentes materiais (material 1 e

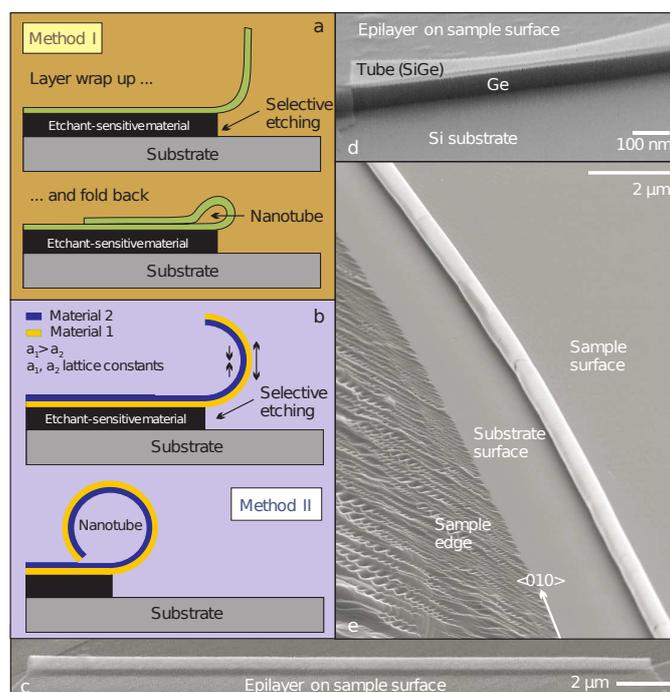


Figura 3: Formação de nanotubos usando um método mais geral (a) e um outro mais específico (b) (veja o texto). As figuras (c) e (d) mostram nanotubos formados pelo primeiro método e a figura (e) mostra um nanotubo formado pelo segundo método [21].

2). O material 1 tem um parâmetro de rede maior que o material 2, de modo que, semelhantemente ao método de Shaji *et al.* [18], quando a bicamada é solta devido à remoção seletiva, o material 1 tende a reduzir sua constante de rede para se adequar ao material 2, que também tem a sua constante de rede modificada (neste caso, aumentada), de modo que as diferenças de tensões entre as duas superfícies fazem com que um nanotubo se forme depois de uma revolução completa. Tempos de remoção maiores resultam em múltiplas revoluções. As Figs.3(c) e (d) mostram nanotubos formados a partir do método I. A Fig.3(e) mostra um nanotubo baseado em SiGe formado através do método II.

Mais recentemente, um novo material conhecido como nanocristal bidimensional surgiu como um potencial substituto da tecnologia de semicondutores atual. Materiais como o dissulfeto de molibdênio – a molibdenita (MoS_2) ou o disseleneto de molibdênio (MoSe_2) formam estruturas em camadas que têm possíveis aplicações futuras em computação devido à sua capacidade de miniaturização dos circuitos elétricos. Esta tecnologia pode permitir a criação de transistores cada vez menores, algo que está se tornando cada vez mais difícil de se conseguir com os dispositivos atuais baseados em silício. Estes nanocristais são considerados bidimensionais pelo fato de poderem existir em forma de camadas

extremamente finas com uma espessura de 0.7 nm ou, grosseiramente falando, a largura de três ou quatro átomos. A Fig.4 mostra imagens ópticas de falsa cor de transistores de efeito de campo criados usando flocos de molibdenita de 2, 6, 9 e 36 nm de espessura, esfoliados sobre um substrato formado por uma camada de dióxido de silício (SiO_2) de 100 nm de espessura sobre uma camada adjacente de silício altamente dopado. A figura também mostra esquematicamente a estrutura do dispositivo. [22]

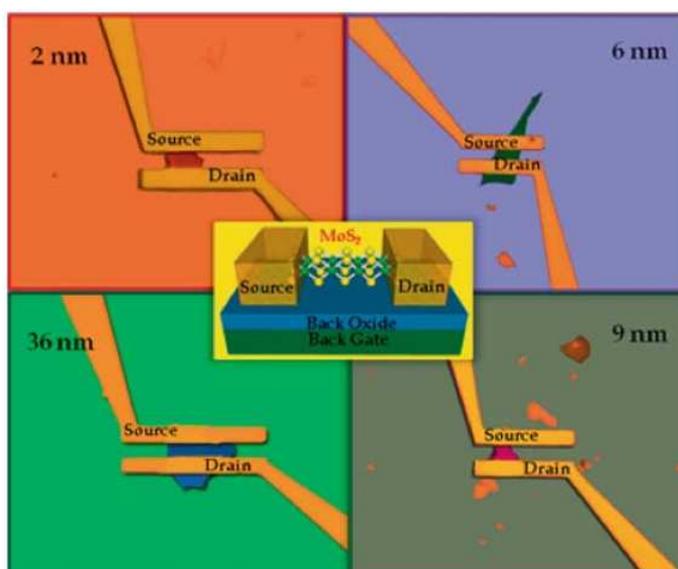


Figura 4: Imagens ópticas em falsa cor de um transistor de efeito de campo *back-gate* com diferentes espessuras de multicamadas de MoS_2 como canal. [22]

A Fig.5 mostra uma representação esquemática de nanoestruturas de disseleneto de molibdênio MoSe_2 e disseleneto de tungstênio WSe_2 . Em (a), vemos a representação da estrutura molecular do nanocristal 2D, a qual é formada por uma camada de átomos de molibdênio ou tungstênio (Mo/W) entre duas camadas de selênio ou enxofre (S/Se); em (b), vemos um nanofilme formado por camadas moleculares verticalmente orientadas em relação a um substrato plano e em (c), vemos a mesma estrutura de (b) crescida sobre um substrato curvo. Apesar de haver uma alta anisotropia no filme e a rede não estar orientada uniformemente, é possível a fabricação de sistemas como este tendo uma orientação uniforme da rede cristalina. [5]

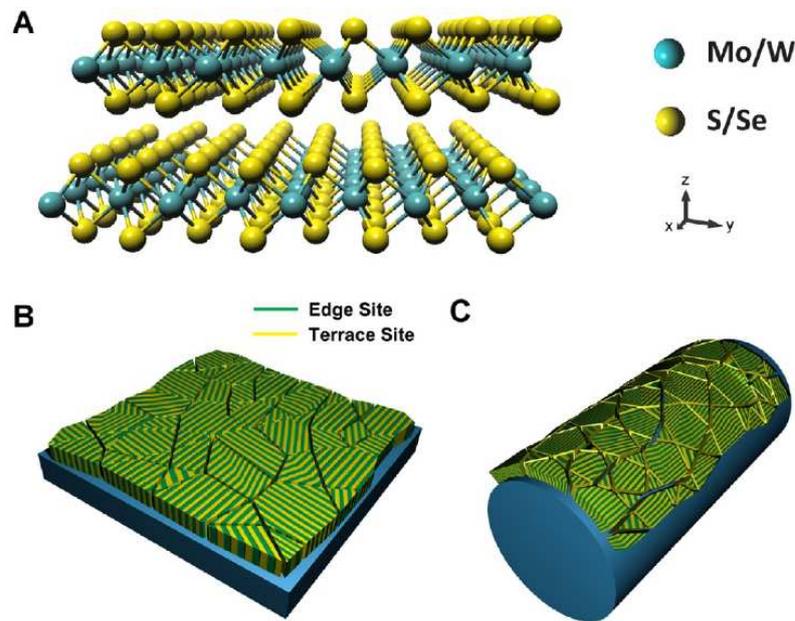


Figura 5: Representação esquemática (a) da estrutura molecular do cristal bidimensional, (b) de um nanofilme crescido com camadas verticais sobre um substrato plano e (c) sobre um substrato curvo. [5]

Uma outra possibilidade é a criação de uma heteroestrutura curva do tipo fio quântico *v-groove* mostrada na Fig.6, que é produzida através da técnica de deposição química em fase vapor, fazendo com que uma camada de GaAs (parte escura) seja posicionada entre duas outras camadas de AlGaAs (parte clara) [23, 24]. A figura mostra a imagem de um microscópio de transmissão eletrônica de seção transversal de um desses fios, no qual a distribuição de carga é mostrada esquematicamente. Neste caso, a maioria dos elétrons são confinados na região de maior curvatura localizada no centro da heteroestrutura, pois além da própria curvatura em si, este ponto ainda possui uma espessura maior do que o restante dos outros pontos da estrutura, fazendo com que o nível de energia do estado fundamental tenha um valor menor nesta região e o confinamento eletrônico seja puramente quântico. Na direção perpendicular à imagem há, portanto, a formação de um fio quântico no ponto onde há maior concentração de elétrons mostrado na figura. No presente trabalho, estudamos membranas curvas semelhantes a estas, mas com uma espessura constante ao longo da estrutura, o que nos possibilita investigar os efeitos produzidos pela curvatura nos elétrons confinados em uma superfície curva.

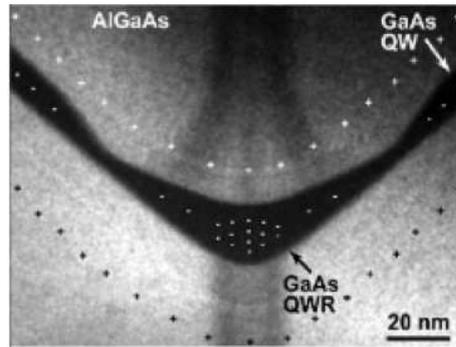


Figura 6: Imagem de microscopia eletrônica de transmissão da seção reta de um sistema conhecido como *v-groove*, que são camadas curvas que formam canais com o formato de um 'V'. A distribuição de carga é mostrada esquematicamente na figura. [23, 24].

1.2 Definição e importância dos semicondutores

Os sólidos conhecidos como semicondutores têm sido objeto de estudo extensivo durante muitas décadas, principalmente pelo grande número de aplicações possíveis, tais como seu uso em retificadores, transistores, células fotoelétricas, magnetômetros, células solares, reprografia, lasers, etc.

Uma característica principal de muitas dessas aplicações é a possibilidade de miniaturização dos dispositivos. Miniaturização é mais que simplesmente uma conveniência: se nos depararmos com o problema de codificar e transmitir mensagens de um satélite, por exemplo, o sistema computador e transmissor deve ser pequeno e trabalhar corretamente por longos períodos sem receber manutenção. A energia disponível para o satélite deve vir da radiação. Dispositivos semicondutores, transistores e células solares fornecem uma solução para esses problemas. Similarmente, os componentes eletrônicos de um marca-passo cardíaco devem consumir pouca energia e ser pequenos o suficiente para tal função. Mas a aplicação mais espetacular e mais importante dos semicondutores é no desenvolvimento da tecnologia da informação, que só foi possível devido à miniaturização dos elementos lógicos, permitindo a construção de sistemas compactos com grande poder ou memória computacional.

A miniaturização tem se tornado possível devido à perfeição das técnicas de fabricação de estruturas semicondutora. Estas permitem a integração de circuitos e, portanto, a produção de dispositivos contendo milhares de elementos, o que torna possível, por exemplo, a criação de potentes processadores de computador em uma área de poucos centímetros quadrados. Todo esse desenvolvimento industrial existiu apenas porque a ciência nos permite entender as propriedades específicas dos semicondutores, e podemos

usar esse conhecimento para criar máquinas eletrônicas na forma desses dispositivos.

Semicondutores podem ser entendidos como isolantes cujas *bandas proibidas* (ou *gaps*) são suficientemente estreitas, de modo que excitações térmicas ou ópticas permitem a um pequeno número de elétrons popular a banda de condução. As funcionalidades desses semicondutores existem devido a esse pequeno número de elétrons, que podem ser influenciados por um pequeno número de impurezas químicas ou mesmo pela superfície do cristal.

Essa sensibilidade prejudicou o entendimento das propriedades desses materiais por muito tempo. Por muitas décadas, os cristais estudados não eram puros o suficiente, de maneira que algumas de suas propriedades pareciam impossíveis de ser reproduzidas usando outros cristais aparentemente idênticos. Assim, o desenvolvimento da física dos semicondutores teve que esperar pelo desenvolvimento da química dos semicondutores e também pela química dos sólidos em geral. Semicondutores são agora um dos tipos de sólidos mais puros e mais reprodutíveis que podem ser criados.

1.3 Elétrons em Cristais

A estrutura de bandas de energia é a relação entre a energia e o momento de um portador em um sólido. Para o elétron livre, a energia é proporcional ao quadrado do momento com fator de proporcionalidade $1/2m$, onde m é a sua massa. No modelo simples de estrutura de bandas, essa mesma relação entre energia e momento é válida, a menos que a massa m é substituída por uma *massa efetiva* m^* . Essa massa modificada é, em alguns casos, uma função da direção do cristal e também da energia do elétron, e inclui a maioria das interações entre os elétrons e o potencial periódico da rede cristalina.

A função de onda para o elétron no cristal satisfaz a Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad (1.1)$$

onde U é um potencial periódico com o mesmo período do cristal. Nos limitaremos à discussão do caso unidimensional da função de onda. Muitos dos resultados representam qualitativamente o caso tridimensional, mas generalizações devem ser feitas com precauções. A equação de Schrödinger para um cristal unidimensional é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = \varepsilon\psi, \quad (1.2)$$

onde o potencial U é uma função periódica na coordenada x com período a , de modo que

$$U(x + a) = U(x). \quad (1.3)$$

O Teorema de Floquet nos permite representar as soluções da Eq.1.2 de maneira muito similar à apresentada no caso de um elétron livre.

Em particular, a função de onda independente do tempo pode ser representada como

$$\psi(x) = \mu(x)e^{ikx} \quad (1.4)$$

onde $\mu(x)$ é uma função periódica com a mesma periodicidade da rede e também é geralmente dependente de k , o qual por sua vez é função de ε .

A forma resultante para a função de onda é similar à função de onda de uma partícula no espaço livre, chamadas de *ondas de Bloch*, e nos permite realizar cálculos de modo análogo aos realizados no caso de um elétron livre. No espaço tridimensional, a Eq.1.4 pode ser generalizada para o potencial U que tem períodos a_x, a_y, a_z nas direções x, y e z , respectivamente.

O modelo unidimensional de Kronig-Penney para um cristal é um caso hipotético de considerável interesse, pois ilustra muito bem o resultado do Teorema de Floquet. Nesse modelo, assumimos que o potencial tem descontinuidades abruptas, como na Fig.7. Nesse caso o período do potencial é $a + b$. A variação abrupta do potencial é muito grosseira se comparada com o caso real em que temos uma cadeia linear de átomos, e portanto não pode ser usada para representar tais cristais. A maior utilidade desse modelo é a obtenção de soluções específicas das funções de onda, e é possível vermos qualitativamente alguns comportamentos esperados em um cristal real. Desse modo, para o modelo de Kronig-Penney precisamos de uma função $\mu(k, x)$, que é periódica com o período $a + b$ e tal que

$$\psi_k(x) = \mu(k, x)e^{ikx}. \quad (1.5)$$

Sendo ε a energia, definimos os símbolos

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} \quad (1.6)$$

e

$$\beta = \frac{\sqrt{2m(\varepsilon - U_0)}}{\hbar}, \quad (1.7)$$

onde β pode ser um número puramente imaginário. A função de onda $\psi(x)$ terá portanto

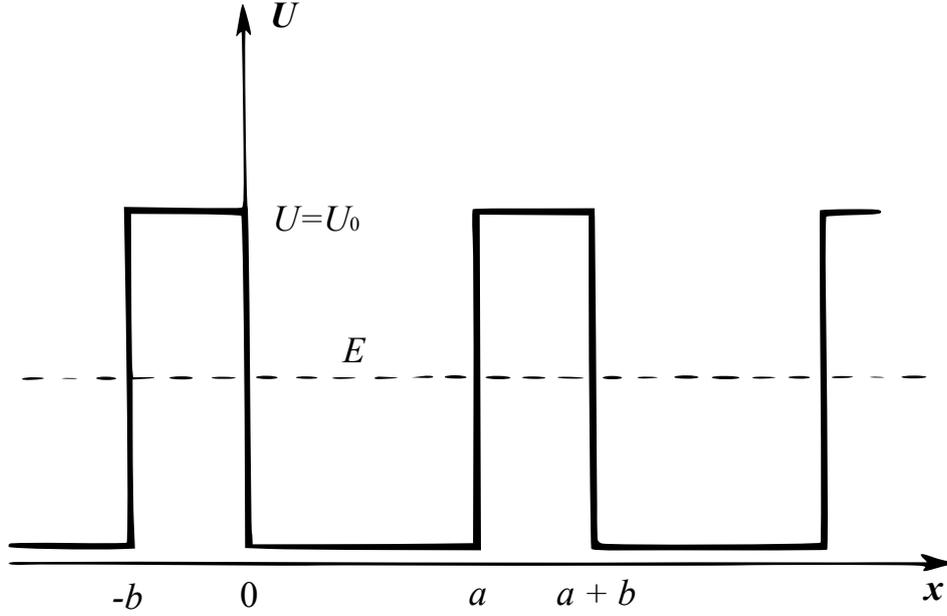


Figura 7: Variação do potencial idealizado pelo modelo de Kronig-Penney. [25]

a forma

$$\psi_1 = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad 0 < x < a \quad (1.8)$$

$$\psi_2 = Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x} \quad -b < x < 0. \quad (1.9)$$

Com a ajuda da Eq.1.5, vemos que $\mu(x)$ tem a forma

$$\mu(k, x) = \psi(x)e^{-ikx} \quad (1.10)$$

$$\mu_1 = A \exp [i(\alpha - k)x] + B \exp [-i(\alpha + k)x] \quad 0 < x < a \quad (1.11)$$

$$\mu_2 = C \exp [i(\beta - k)x] + D \exp [-i(\beta + k)x] \quad -b < x < 0, \quad (1.12)$$

onde os coeficientes A , B , C e D devem ser determinados. Os requisitos para a continuidade da função de onda e sua derivada em $x = 0$, a e $-b$ nos dão um conjunto de quatro equações que permitem a determinação dos valores de A , B , C e D . Esse conjunto de restrições corresponde a quatro equações para os coeficientes A , B , C , D , as quais somente têm soluções não triviais para valores específicos de α , β e k . Para um dado valor de ε , a e b , os valores de α , β e k são determinados. Em alguns casos, encontramos que a constante de propagação k é de fato um número puramente imaginário, e em alguns casos k é real. Um caso especial com as mesmas características qualitativas do caso geral é aquele em que a distância b tende a zero, mantendo o produto U_0b constante.

Desse modo, fazendo $U_0 b = \delta = cte$, $U_0 \rightarrow \infty$, $\beta \rightarrow i\infty$, $b \rightarrow 0$, $(\beta b)^n \rightarrow 0$ ($n > 0$) e $\beta^2 b \rightarrow 2m\delta/\hbar^2$, a função $\mu_k(x)$ será então

$$\mu_1 = A \exp [i(\alpha - k)x] + B \exp [-i(\alpha + k)x] \quad (1.13)$$

$$\mu_2 \rightarrow C + D \quad (1.14)$$

$$\mu_2'(0) \rightarrow (C - D)i\beta - ik(C + D) \quad (1.15)$$

$$\mu_2'(-b) \rightarrow (C - D)i\beta + (C + D)\frac{-2m\delta}{\hbar^2} - ik(C + D). \quad (1.16)$$

O resultado desse processo de limitação é que $\mu_2(x)$ é quase constante na distância infinitesimal $(-b, 0)$, embora tenha uma curvatura acentuada, de maneira que a derivada da função μ pode ser contínua. A aplicação das condições de contorno nas quatro equações anteriores resulta na relação

$$\frac{m\delta a \sin \alpha a}{\hbar^2 \alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka. \quad (1.17)$$

Note que o lado esquerdo é uma função do sistema e de sua energia ($\alpha = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar}$) e que o lado direito é uma função da constante de propagação ou número de onda k . O valor de δ é uma medida de quão “ligados” os elétrons estão em relação aos átomos. A Eq.1.17 é uma relação entre energia e número de onda. Se não houvesse ligação, isto é, se $\delta = 0$, o problema seria reduzido à situação de uma partícula livre, e portanto $\alpha = k$, ou

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.18)$$

Na verdade, existem outras soluções para a Eq.1.17 neste caso especial, mas podemos excluir estas soluções se o limite $\delta \rightarrow 0$ é imposto antes de as condições de contorno serem aplicadas. Para um δ finito, vemos que para cada α (energia) existe um número infinito de possíveis valores de k (número de onda), e que como o aumento de k em $2n\pi/a$ não altera o lado direito da Eq.1.17, a função $\varepsilon = \varepsilon(k)$ é periódica e tem o período igual a $2\pi/a$.

Consideremos agora a natureza da função $\varepsilon(k)$. A Fig.8 é um esboço dos lados esquerdo $f(\alpha a)$ e direito $f(ka)$ da Eq.1.17 para $m\delta a/\hbar^2 = 10$. Os únicos valores permitidos de a são aqueles para os quais

$$\left| \frac{m\delta a \sin \alpha a}{\hbar^2 \alpha a} + \cos \alpha a \right| < 1. \quad (1.19)$$

Conseqüentemente, temos bandas de energias permitidas e bandas de energias proibidas. A banda proibida é na verdade uma banda de energia na qual a constante de propagação

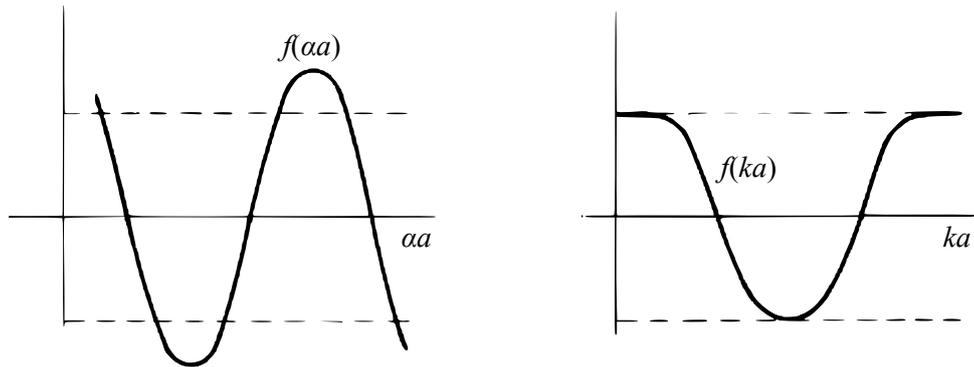


Figura 8: Representação gráfica da solução para $\varepsilon = \varepsilon(k)$ para o modelo de Kronig-Penney. À esquerda vemos a curva representando o lado esquerdo $f(\alpha a)$ da Eq.1.17 e à direita vemos a representação de $f(ka)$, o lado direito da Eq.1.17 [25].

é um número puramente imaginário, que corresponde à atenuação da onda através do cristal. A Fig.9 mostra a curva de $\varepsilon(k)$ que é obtida a partir da Fig.8. As linhas sólidas mostram a relação da função da partícula livre, e as linhas tracejadas enfatizam a natureza periódica da relação. Podemos impor condições de contorno periódicas da função de onda

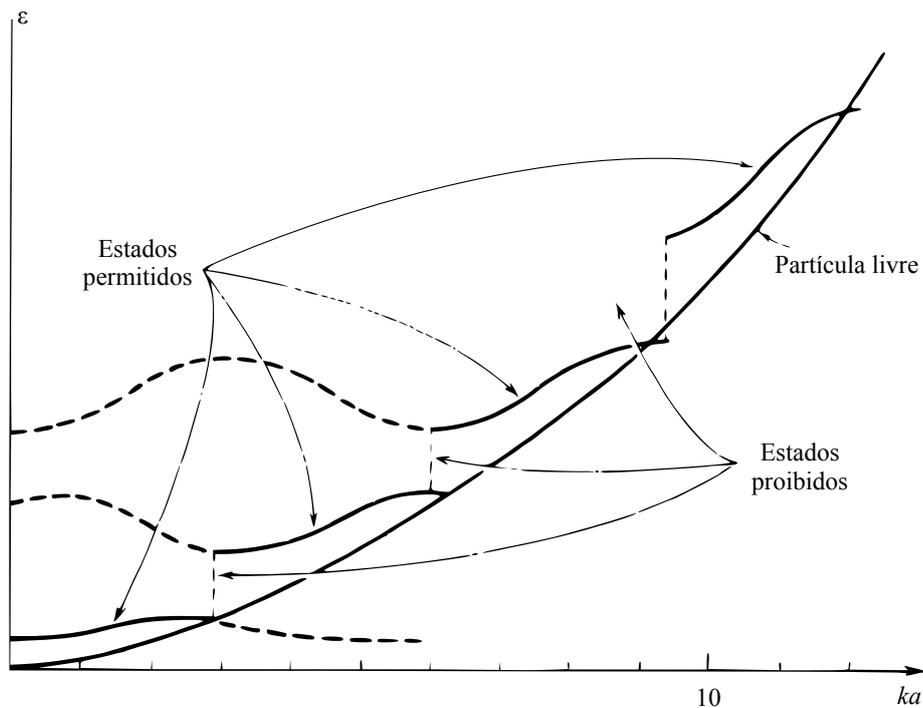


Figura 9: Curva de ε versus k para o modelo de Kronig-Penney [25].

no cristal, em que L é o parâmetro de rede, de modo que

$$\psi(0) = \psi(L), \quad (1.20)$$

e a conservação do número total de partículas requer que

$$\psi'(0) = \psi'(L). \quad (1.21)$$

Notamos que se a função $U(x)$ tem o período a o cristal será constituído de um número inteiro de células. Se N é o total de células (ou períodos) no comprimento L , então temos que os valores permitidos de k são discretos e dados por

$$k = \frac{2n\pi}{Na} = \frac{2n\pi}{L}, \quad (1.22)$$

onde n é um número inteiro. Uma soma de funções de onda que satisfaz a Eq.1.22 também irá satisfazer as condições periódicas de contorno. No caso de funções de onda para uma partícula livre, recorreremos ao Teorema de Fourier, que mostra que qualquer distribuição de probabilidade inicial específica pode ser representada por meio de uma soma de senos e cossenos. Aplicando esta propriedade às funções de Bloch, podemos escrever uma função geral

$$\psi = \sum A_{k\mu}(k, x)e^{ikx}, \quad (1.23)$$

onde

$$k = \frac{2n\pi}{L}. \quad (1.24)$$

A função de onda da Eq.1.23 deve ser normalizada, isto é,

$$\int_0^L \psi^* \psi dx = 1. \quad (1.25)$$

As médias da posição, momento e energia são obtidas como no caso da partícula livre, mas o processo é mais complicado devido à função periódica $\mu(x)$.

A função de onda dependente do tempo tem a forma

$$A(k)\mu(k, x) \exp(ikx) \exp\left(\frac{\varepsilon t}{i\hbar}\right). \quad (1.26)$$

O valor médio do momento é

$$\langle p \rangle = \int_0^L \psi \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx. \quad (1.27)$$

e o valor médio da energia é

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^L \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + qV(x) \right] \psi dx. \quad (1.28)$$

Por fim, o valor médio do número de onda k é obtido de acordo com o peso de cada função

de Bloch no pacote de onda. Assim,

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A^*(k)kA(k)dk. \quad (1.29)$$

A velocidade do elétron em relação ao cristal é determinada por uma relação análoga ao resultado para a velocidade de grupo, e da derivada da frequência em relação à constante de propagação. Em particular, a relação é dada por

$$\langle p \rangle = \frac{m}{\hbar} \left\langle \frac{d\varepsilon}{dk} \right\rangle \quad (1.30)$$

ou

$$\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \left\langle \frac{d\varepsilon}{dk} \right\rangle. \quad (1.31)$$

A Eq.1.30 nos diz que o valor médio do momento do elétron é zero quando houver um mínimo de energia ($d\varepsilon/dk = 0$). Para o caso tridimensional, podemos reescrever a Eq.1.31 como

$$\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \nabla_k \varepsilon \rangle. \quad (1.32)$$

Diferenciando a equação de Schrödinger em relação a k , encontramos

$$-\nabla_k \varepsilon \psi(r, k) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + U - \varepsilon \right) [i\mathbf{r}\psi + (\nabla_k \mu) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] = 0, \quad (1.33)$$

onde fizemos uso do fato de a função de onda $\psi(x, k)$ ser dada pelas funções de Bloch da Eq.(1.23). Os subscritos \mathbf{k} e \mathbf{r} em ∇ e ∇^2 simplesmente denotam as variáveis de diferenciação. Assim, obtemos

$$-\nabla_k \varepsilon \psi(r, k) - \frac{i\hbar^2}{m} \nabla_r \psi + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + U - \varepsilon \right) (\nabla_k \mu) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 0. \quad (1.34)$$

Agora, multiplicando a Eq.(1.34) por $\bar{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ e integrando sobre os volumes do espaços real e recíproco, resulta

$$\langle \nabla_k \varepsilon \rangle - \frac{\hbar}{m} \langle \mathbf{r} \rangle - \int_{V_{r,k}} \bar{\psi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U - \varepsilon \right) (\nabla_k \mu) e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}} dV = 0. \quad (1.35)$$

Aplicando o teorema de Green ao último termo da Eq.(1.35), e considerando a natureza periódica de μ assim como as condições periódicas de contorno, conseguimos mostrar que a integral é, de fato, nula. As funções envolvidas satisfazem as condições que permitem $\bar{\psi}$ e $\nabla_k \mu e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ permutarem na integral, e o integrando resultante é zero [25]. A Eq.(1.31) para a velocidade resulta em $\langle \mathbf{p} \rangle = m \langle \mathbf{v} \rangle$.

Diferenciando a Eq.1.32 em relação a t encontramos a aceleração do elétron. Assim,

$$\frac{d}{dt}\langle v_i \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left\langle \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i} \right\rangle = \frac{1}{\hbar} \left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} \right\rangle, \quad (1.36)$$

onde escrevemos apenas uma componente do tensor aceleração. A aceleração, que é dependente da direção, tem uma dependência que não pode ser expressa em termos de notação vetorial. O termo $\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \cdot d\mathbf{k}/dt$ em geral pode conter termos de produtos cruzados da forma $k_i dk_j/dt$, nos quais uma força na direção j produz uma aceleração na direção i .

A Eq.1.36 pode ser simplificada [25], de modo a obtermos

$$\frac{d}{dt}\langle v_i \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i^2} \frac{dk_i}{dt}, \quad (1.37)$$

isto é, a aceleração ao longo do eixo i depende apenas da variação da i -ésima componente do número de onda. Se uma força externa F é aplicada aos elétrons no cristal, esperamos uma mudança no momento $\langle \mathbf{p} \rangle$. O cálculo da aceleração a partir da equação de Schrödinger é muito difícil nesse caso devido à complexidade do potencial da rede cristalina. Uma situação menos geral é aquela em que a aproximação semi-clássica pode ser usada para os pacotes de onda. É possível mostrar que, para o caso semi-clássico, o número de onda \mathbf{k} tem uma derivada temporal proporcional à força externa aplicada [26]. A taxa de variação da energia é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \varepsilon \rangle}{dt} &= \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \\ &= \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon. \end{aligned} \quad (1.38)$$

A taxa de variação da energia também pode ser escrita como

$$\frac{d\langle \varepsilon \rangle}{dt} = \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (1.39)$$

A força \mathbf{F} tem uma direção arbitrária e as duas últimas equações só devem ser satisfeitas se

$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{k} = \mathbf{F} \quad (1.40)$$

e, combinando as Eq.1.37 e 1.40, obtemos

$$\frac{d}{dt}\langle v_i \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i^2} F_i. \quad (1.41)$$

Definimos o número

$$\frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial k_i^2} = m_i^* \quad (1.42)$$

como a massa efetiva ao longo do eixo i , e $\hbar k_i$ como o momento do cristal ao longo desse eixo. O momento do cristal não deve ser confundido com o momento da partícula. Uma partícula pode ter o momento do cristal diferente de zero e estar em repouso se o mínimo de energia ocorrer em $k \neq 0$. A massa efetiva tem um significado análogo ao da massa real da partícula livre, e o momento do cristal tem um significado análogo ao do momento real da partícula. Portanto temos, para uma partícula livre,

$$\begin{aligned} F_i &= m_i^* \frac{dv}{dt} \\ &= \frac{d}{dt}(\hbar k_i). \end{aligned} \quad (1.43)$$

Como dissemos anteriormente, os elétrons do cristal se comportam como um único elétron livre que possui uma massa diferente da massa do elétron, devido às interações dos elétrons do cristal com o potencial da rede cristalina. Esse conceito é utilizado no presente trabalho e permite-nos trabalhar como se estivéssemos resolvendo o problema de um elétron livre, sendo portanto de grande utilidade.

1.4 Confinamento Quântico

O confinamento quântico causa uma grande mudança no comportamento dos portadores. A Fig. 10 mostra esquematicamente a redução de dimensionalidade de um sistema $3D$ para um $0D$ e suas respectivas densidades de estados. No material *bulk*, composto por uma única liga ou elemento, os elétrons não possuem confinamento, tendo 3 graus de liberdade, como mostra a Fig. 10(a). Partículas podem ser confinadas em $2D$, como no poço quântico, ficando livres no plano e confinadas em uma única direção, como na Fig. 10(b). Reduzindo ainda mais a dimensionalidade, podemos produzir um confinamento $1D$, como no caso do fio quântico da Fig. 10(c). Obtemos um sistema $0D$ confinando mais uma direção, como é o caso do ponto quântico da Fig. 10(d).

Em sistemas bidimensionais, como no poço quântico, os portadores estão livres no plano, e sua energia é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) + E_z^{(n)}, \quad (1.44)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. O espectro de energia é quantizado somente na direção z , em que há confinamento. Para um sistemas unidimensional, como um fio quântico, os portadores

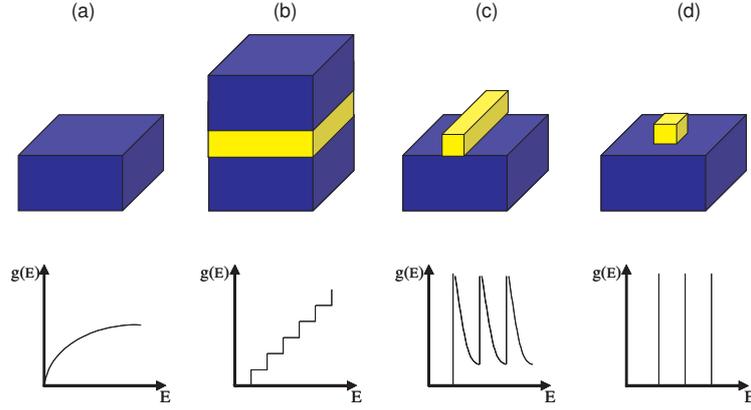


Figura 10: Confinamento das heteroestruturas em relação à dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e suas respectivas densidades de estados.

estão livres apenas na direção x . Assim, temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.45)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. Ao confinarmos os portadores em todas as direções, como nos pontos quânticos, temos

$$E = E_x^{(l)} + E_x^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.46)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$ onde obtemos um espectro de energia completamente discreto. Neste trabalho, estudaremos o confinamento de elétrons em fios quânticos e em sistemas de barreiras com confinamento em uma única direção, como no caso do poço.

1.5 Níveis de Landau

Um elétron livre é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*}. \quad (1.47)$$

Quando o elétron é colocado em um campo magnético \mathbf{B} , temos que substituir o momento \mathbf{p} por $\mathbf{p} - q\mathbf{A}$, onde \mathbf{A} é o potencial vetor e $q = -e$ é a carga do elétron. O Hamiltoniano então se torna:

$$H = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2. \quad (1.48)$$

Como $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, para um dado \mathbf{B} podemos ter um infinito número de potenciais vetores, porque $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$ leva ao mesmo valor de campo magnético. Para um \mathbf{A} diferente, a função de onda obtida também será diferente, mas os observáveis não devem mudar sob

tal transformação de gauge. Assumimos agora que o campo magnético está ao longo da direção z , $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, e escolheremos o gauge de Landau para o potencial vetor, isto é, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. Isto leva ao Hamiltoniano,

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*} (p_y + eBx)^2 + \frac{p_z^2}{2m^*}. \quad (1.49)$$

Como $[H, p_y] = 0$ e $[H, p_z] = 0$, os momenta p_y e p_z são constantes do movimento e, conseqüentemente, podemos escolher as funções de onda como:

$$\Psi(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} \varphi(x). \quad (1.50)$$

A equação de Schrödinger é $H\Psi = E\Psi$, onde $p_x \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$. Isso leva à equação diferencial de segunda ordem

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m^*} (\hbar k_y + eBx)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right] \varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.51)$$

a qual pode ser reescrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x - x_0)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right] \varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.52)$$

onde $\omega_c = eB/m^*$ é a frequência ciclotrônica, com $x_0 = -l_B^2 k_y$ e $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ sendo o comprimento magnético. Essa é a equação diferencial de um oscilador harmônico unidimensional deslocado. Assim, encontramos o espectro de energia

$$E_{n, k_y, k_z} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \quad (1.53)$$

e a função de onda

$$\varphi_n(x - x_0) = H_n((x - x_0)/l_B) e^{-(x-x_0)^2/l_B^2}, \quad (1.54)$$

onde $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite. Os números quânticos são n , k_y , k_z e a energia é degenerada em k_y . O significado do número quântico k_y é o seguinte: $\langle x \rangle = x_0 = -l_B k_y$ e k_y é conectado com a posição em torno da qual o elétron descreve a órbita ciclotrônica. Além disso, nós temos $\langle p_y \rangle = \hbar k_y$, e então $\langle m^* v_y \rangle = \langle p_y + eBx \rangle = \hbar k_y + eBx_0 = 0$ e o valor esperado da velocidade eletrônica é zero mesmo quando $k_y \neq 0$. Assim, k_y não é mais conectado com a velocidade do elétron, mas sim com o valor esperado da posição. Perceba que um elétron em um campo magnético, quando descrito dentro do gauge de Landau, é matematicamente equivalente a um oscilador harmônico unidimensional. O espectro de energia para um elétron se movendo no espaço 2D ou 3D é ilustrado na Fig.11. Observe que no caso 2D o espectro de energia é completamente quantizado e equidistante. No

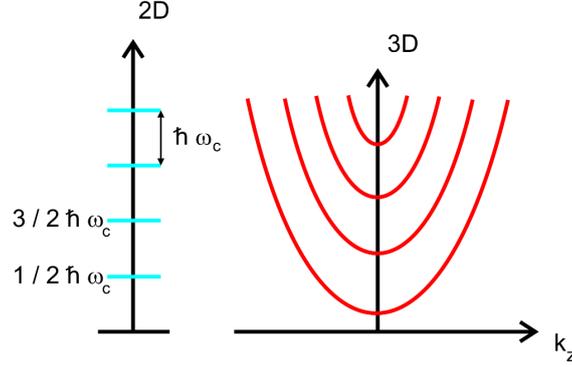


Figura 11: Espectro de energia de um elétron na presença de um campo magnético confinado em um sistema 2D e 3D.

caso 3D o espectro consiste de parábolas equidistantes. Para o *GaAs* ($m^*/m = 0.067$) e $B = 10$ T o ponto de energia zero é $\hbar\omega_c/2 = 8.6$ meV e o comprimento magnético é $l_B = 81 \text{ \AA} = 8.1$ nm.

1.6 Densidade de Estados (DOS)

A densidade de estados (DOS) é definida por

$$D(E) = \langle \delta(E - H) \rangle = \sum_n \sum_{k_y} \langle n, k_y | \delta(E - H) | n, k_y \rangle, \quad (1.55)$$

onde $|n, k_y\rangle$ é o autoestado de um elétron em um espaço 2D sob um campo magnético e com energia $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. No caso de um sistema suficientemente longo na direção y , podemos substituir o somatório \sum_{k_y} pela integral $L_y/2\pi \int dk_y$, encontrando então que

$$D(E) = \sum_n \frac{L_y}{2\pi} \int dk_y \delta(E - E_n). \quad (1.56)$$

Temos $k_y = -x_0/l_B^2$ e então podemos converter a integral sobre o vetor de onda em uma integral sobre a coordenada espacial

$$\begin{aligned} D(E) &= \frac{L_y}{2\pi} \frac{1}{l_B^2} \sum_n \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx_0 \delta(E - E_0) \\ &= A \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_n \delta(E - E_0), \end{aligned} \quad (1.57)$$

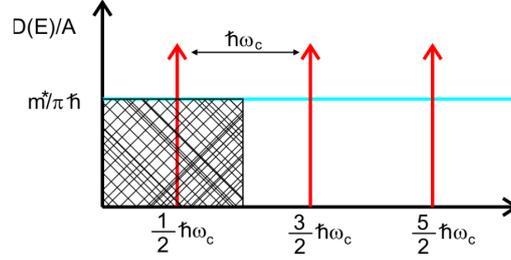


Figura 12: Densidade de estados por unidade de área de um elétron confinado em um sistema 2D sob um campo magnético perpendicular.

onde $A = L_x L_y$ é a área da superfície do 2DEG. A densidade de estados por área da superfície é

$$D(E)/A = N_n \sum_n \delta(E - E_0), \quad (1.58)$$

onde $N_n = 1/2\pi l_B^2 = eB/2\pi\hbar$ é o número de estados por nível de Landau por unidade de área. Assim, N_n é a degenerescência do nível de Landau, a qual é independente do número do nível ou das propriedades do cristal. A DOS é ilustrada na Fig.12. A degenerescência de cada nível de Landau pode ser entendida da seguinte maneira: o número de estados correspondentes a cada nível de Landau é dado pelo número de estados contidos em um intervalo de energia $\hbar\omega_c$ do 2DEG para $B = 0$. Temos:

$$\frac{m^*}{\pi\hbar^2} \hbar\omega_c = \frac{m^*}{\pi\hbar} \frac{eB}{m^*} = \frac{1}{\pi} \frac{eB}{\hbar} = \frac{1}{\pi l_B^2}. \quad (1.59)$$

Note que existe um fator 2 devido ao *spin*. Portanto, o número total de estados é $2N_n$, onde N_n é o número de estados por nível sem *spin*.

1.7 Energia de Fermi

A energia de Fermi é determinada através da densidade eletrônica

$$n_e = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE [D(E)/A] F(E) \quad (1.60)$$

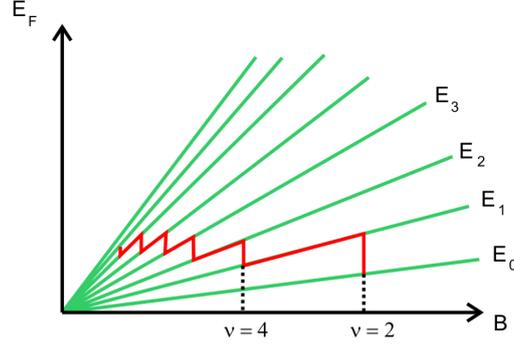


Figura 13: Níveis de Landau e a energia de Fermi como função do campo magnético.

onde o fator de 2 é devido ao spin do elétron e $F(E)$ é a função de Fermi. A $T = 0$, $F(E) = \Theta(E_F - E)$. Consequentemente, temos

$$\begin{aligned} n_e &= 2 \int_0^{E_F} dE \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - E_n) \\ &= \frac{1}{\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} \Theta(E_F - E_n) \end{aligned} \quad (1.61)$$

ou

$$n_e \pi l_B^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta(E_F - E_n) \quad (1.62)$$

onde $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. A partir dessa equação, podemos determinar a energia de Fermi como função do campo magnético, como ilustrado na Fig.13. O número de níveis de Landau ocupados é dado pelo fator de preenchimento $\nu = 2\pi l_B^2 n_e$, onde o nível de Landau mais alto ocupado é: $N = [\nu/2] \sim 1/B$. Para temperaturas maiores que zero, a integral da Eq.1.60 deve ser resolvida numericamente

1.8 Sumário

No Capítulo 2, estudamos as propriedades termodinâmicas de um gás de elétrons bidimensional confinado em um setor de um cilindro circular. Partindo da equação de Schrödinger e usando a aproximação da massa efetiva, calculamos o espectro de energia e a densidade de estados para sistemas como esse sob a ação de um campo magnético perpendicular ao eixo do cilindro. Aplicamos estes resultados para calcularmos o potencial químico e o calor específico desses sistemas, concluindo que as propriedades do gás dependem do tamanho da área de confinamento, da intensidade e da direção do campo magnético perpendicular.

No Capítulo 3 investigamos como a curvatura de um filme semicondutor afeta suas propriedades eletrônicas e de transporte e estudamos como o potencial efetivo criado exclusivamente da curvatura do filme modifica sua estrutura de bandas. Através de um campo elétrico transversal externo, conseguimos induzir um confinamento, de modo que as propriedades de estrutura de bandas, tais como o *gap* de energia e a curvatura da banda podem ser controladas por um parâmetro externo. Também mostramos que, para alguns valores de campo elétrico é possível obtermos bandas de Dirac para uma estrutura curva suave. Além disso, usamos a propagação de pacotes de onda nessas estruturas para demonstrar que as curvas são responsáveis por transições significativas entre bandas.

No Capítulo 4, fazemos as conclusões acerca dos trabalhos apresentados nesta tese e apresentaremos as perspectivas sobre trabalhos futuros.

2 *Propriedades Termodinâmicas de um Gás de Elétrons em uma Superfície Curva*

Estudamos as propriedades termodinâmicas de um gás de elétrons 2D confinado em um setor cilíndrico circular imerso em uma região de campo magnético contínuo e perpendicular ao eixo do cilindro. Essa configuração de campo produz, sobre os elétrons na superfície curva, efeitos similares aos produzidos por um campo magnético não-homogêneo em uma superfície plana. Estudamos estes efeitos ao calcularmos o espectro de energia para diferentes raios de curvatura e simetrias do campo magnético com respeito à superfície. A análise da densidade de estados, potencial químico e calor específico destes sistemas ajuda-nos a entender a correlação existente entre a simetria do campo controlado externamente e as propriedades físicas do gás.

2.1 Introdução

Propriedades físicas de um gás de elétrons em uma superfície curva têm sido estudadas desde a segunda metade do último século [29]. A disponibilidade de amostras de baixa dimensionalidades com estruturas não-planares de boa qualidade permitiu estudos experimentais detalhados sobre suas propriedades físicas, motivando ainda mais a pesquisa sobre o melhor entendimento dos efeitos de confinamentos não-planares em suas características físicas. Fios quânticos e nanotubos de carbono [30, 31] são exemplos de sistemas curvos bem estudados. Na última década, amostras com portadores de carga confinados em superfícies curvas têm sido preparadas e trabalhos sobre as propriedades físicas destes sistemas quânticos têm sido realizados [32, 33]. Entre outros, ressaltamos o artigo de Friedland *et al.* [34], que estudaram o efeito Hall quântico em um gás de elétrons 2D confinado na superfície de um cilindro; Marchi *et al.* [35] reportaram um trabalho sobre transporte coerente de elétrons em superfícies cilíndricas curvas; e o artigo de Trushin

e Schliemann [36] mostrou algumas propriedades físicas do gás de elétrons 2D (2DEG) confinado em uma camada curva. Também devem ser mencionados os trabalhos de Ferrari *et al.* [37,38], o qual estuda a influência de um campo magnético transversal sobre as características físicas de um gás de elétrons bidimensional (2D) cilíndrico (C2DEG).

Sistemas com essas características também foram estudados por Lorke e seus colaboradores [16]. Eles usaram a técnica de *decolagem epitaxial* (Epitaxial Lift-Off) para a preparação desses sistemas e analisaram as propriedades físicas do gás de elétrons confinado em uma superfície cilíndrica com raio $R \sim 1$ mm; Shaji *et al.* [18], usando uma técnica diferente, prepararam e estudaram sistemas similares com raio próximo de $1 \mu\text{m}$. Deve ser ressaltado que, na presença de um campo magnético constante perpendicular ao eixo do cilindro, esses sistemas curvos comportam-se como sistemas planos sob a ação de um campo magnético não-uniforme dependente da posição ao longo da superfície.

Portadores confinados em uma pequena região de uma superfície curva têm suas características físicas controladas pelo tamanho da superfície, mas a curvatura também desempenha um importante papel em controlar estas propriedades. Além disso, um campo magnético perpendicular ao eixo do cilindro produz efeitos similares aos causados por um campo magnético não-homogêneo sobre uma superfície plana. Juntos, esses efeitos vão controlar comportamentos físicos e podem ser utilizados para dar a esse tipo de sistema algumas características específicas. É o caso do sistema estudado neste trabalho, que consiste de um C2DEG semelhante àquele estudado por Chaplik *et al.* [39]. Pode ser descrito como um gás de elétrons 2D confinado em um setor de um cilindro circular de raio R , sob a ação de um campo magnético uniforme perpendicular ao eixo do cilindro. Como mencionado acima, em conjunto, o raio de curvatura, a área da superfície e a inclinação do campo em relação ao vetor normal à superfície em sua borda controlam a não-homogeneidade do campo magnético efetivo, agindo sobre o sistema e, conseqüentemente, sobre as suas propriedades. Nosso principal objetivo é calcular as características físicas desses sistemas para diferentes ângulos entre o campo magnético e a direção de referência.

O primeiro passo é calcular o espectro de energia para diferentes valores do raio de curvatura, campo magnético e área do setor. Uma vez que o espectro de energia é conhecido, calculamos a densidade de estados, o potencial químico e o calor específico para obter a dependência dessas quantidades físicas sobre a geometria do sistema, isto é, a dependência em relação à distribuição da falta de homogeneidade do campo magnético na superfície do sistema. Vamos mostrar que todas as características físicas destes sistemas

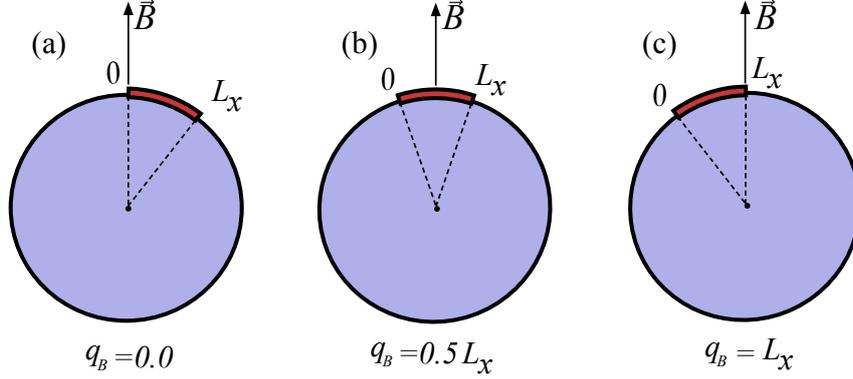


Figura 15: Perfil da estrutura formada pela superfície S depositada sobre um tubo cilíndrico para diferentes valores de q_B , que é definido como o ponto ao longo de q_1 em que o campo magnético corta perpendicularmente a superfície S . Nas situações em que a superfície está mais assimétrica em relação ao campo magnético \vec{B} , $q_B = 0$, L_x e no caso simétrico, $q_B = 0.5L_x$.

depositada sobre um tubo cilíndrico de raio R , onde q_1 é a coordenada na superfície do cilindro ao longo da direção de maior curvatura com origem na extremidade esquerda da superfície S (ver Fig.14), variando de 0 a L_x (L_x é constante); q_2 coincide com o eixo do cilindro e q_3 é a distância normal do ponto Q no espaço ao ponto P na superfície, como mostrado na Fig.14. O gás está sob a influência de um campo magnético fixo dado por $\vec{B} = (0, 0, B_3)$, de modo que a inclinação do campo em relação à superfície é realizada através de rotações da superfície S em torno do eixo do cilindro. Como o campo magnético é fixo na direção \hat{z} , uma escolha conveniente do potencial vetor é dada pelo gauge de Landau $\vec{A} = (0, B_3 x, 0)$. A variável q_B informa o ponto na superfície ao longo de q_1 em que a componente efetiva do campo magnético é máxima, ou seja, o ponto em que o campo magnético corta S perpendicularmente. Na Fig.15, vemos esquematicamente como a variável q_B é definida: (a) $q_B = 0.0$ quando o \vec{B} está alinhado à esquerda de S ; (b) $q_B = 0.5L_x$ quando a direção de \vec{B} é simétrica em relação à superfície de confinamento; e (c) $q_B = L_x$ quando o campo está alinhado à direita de S .

Assumimos que o gás está inicialmente livre no espaço e, em seguida, impomos as condições de confinamento bidimensional na superfície S . O vetor \vec{r} , o qual localiza o gás em um ponto Q do espaço, é dado, em coordenadas cartesianas, por

$$\vec{r} = R\xi \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \hat{x} + q_2 \hat{y} + R\xi \cos\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \hat{z}, \quad (2.4)$$

onde $\xi = (R + q_3)/R$ e q_B é o ponto onde o eixo z (eixo da direção do campo magnético)

corta a superfície ao longo de q_1 . Os coeficientes métricos são:

$$h_1 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \right| = \xi; \quad (2.5)$$

$$h_2 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} \right| = 1; \quad (2.6)$$

$$h_3 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_3} \right| = 1; \quad (2.7)$$

Assim, $\partial/\partial x = (1/\xi) \cos(q_1/R) \partial/\partial q_1 + (1/R) \sin(q_1/R) \partial/\partial \xi$, $\partial/\partial y = \partial/\partial q_2$, $\partial/\partial z = -(1/\xi) \sin(q_1/R) \partial/\partial q_1 + (1/R) \cos(q_1/R) \partial/\partial \xi$ e o laplaciano é dado por

$$\nabla^2 = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} + \frac{1}{R^2 \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}. \quad (2.8)$$

A equação de Schrödinger para o gás livre é dada por

$$\frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} \Psi + V_\lambda(\xi) \Psi = \varepsilon \Psi, \quad (2.9)$$

onde e é o módulo da carga do elétron ($e > 0$), V_λ é um potencial de confinamento na direção de ξ e λ é um fator de confinamento da superfície, de maneira que o limite de V_∞ é zero quando $\xi \rightarrow 1$ e infinito quando $\xi \neq 1$. Podemos escrever

$$\frac{p^2}{2m} \Psi - \frac{e}{2m} [\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}] \Psi + \frac{e^2 A^2}{2m} \Psi + V_\lambda(\xi) \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (2.10)$$

Substituindo o valor de $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{ei\hbar}{2m} [\vec{\nabla} \cdot (\vec{A} \Psi) + \vec{A} \cdot (\vec{\nabla} \Psi)] + \frac{e^2 A^2}{2m} \Psi + V_\lambda(\xi) \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (2.11)$$

O termo entre colchetes é resolvido em coordenadas cartesianas, e a equação fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{i\hbar e}{2m} \left[2B_3 R \xi \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \frac{\partial \Psi}{\partial q_2} \right] + \frac{e^2}{2m} B_3^2 R^2 \xi^2 \sin^2\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \Psi + V_\lambda(\xi) \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (2.12)$$

Fazendo a separação $\Psi = e^{ik_2 q_2} \varphi(q_1) \sigma(\xi) / \sqrt{\xi}$, obtemos [40]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{d^2 \varphi}{\varphi dq_1^2} - k_2^2 + \frac{1}{R^2 \sigma} \frac{d^2 \sigma}{d\xi^2} + \frac{1}{4\xi^2 R^2} \right] - \frac{ek_2 \hbar}{2m} \left[2B_3 R \xi \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \right] + \frac{e^2}{2m} \left[B_3 R \xi \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) \right]^2 + V_\lambda(\xi) = \varepsilon. \quad (2.13)$$

Impondo a condição de que o gás está totalmente confinado na superfície S ($\xi \rightarrow 1$), a

Eq.(2.13) pode ser separada em duas equações

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dq_1^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left[R \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) - q_0 \right]^2 \varphi = E\varphi, \quad (2.14)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{d^2\sigma}{d\xi^2} + V_\lambda(\xi)\sigma = \epsilon\sigma, \quad (2.15)$$

onde $q_0 = \hbar k_2/eB_3$, $\sigma = \sqrt{2/\beta} \cos(\pi\xi/\beta)$ é a função de onda do estado fundamental na direção de ξ , onde β é a largura do poço de potencial infinito que varia de $-\beta/2$ a $+\beta/2$ ($\beta \rightarrow 0$) com energia do estado fundamental $\epsilon = \hbar^2\pi^2/2m\beta^2$ tendo um valor constante, gerando apenas um *shift* no valor da energia total do sistema; k_2 é o número de onda na direção q_2 , $\omega = eB_3/m$ e $E = E_n(k_2) + (\hbar^2/8mR^2)$. Aqui, $E_n(k_2)$ são as energias dos estados 2D, e o outro termo é a energia adicional devido à curvatura da superfície [40] (ver Apêndice B), a qual é constante e gera apenas um shift de energia. A Eq.(2.14) pode ser facilmente verificada na literatura existente [41] e pode ser simplificada [16] escrevendo-se $q_1 = q_m + q'_1$, onde

$$q_m = R \arcsin\left(\frac{q_0}{R}\right) + q_B \quad (2.16)$$

é o valor mínimo do potencial efetivo produzido pelo campo magnético, e q'_1 é a posição medida a partir de q_m . Se a largura da faixa é pequena comparada com R ($q'_1 \ll R$),

$$R \sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) - q_0 \simeq (q_1 - q_m) \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right) \quad (2.17)$$

e a Eq.(2.14) pode ser reescrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dq_1^2} + \frac{1}{2}m \left(\omega \cos\frac{q_m - q_B}{R} \right)^2 (q_1 - q_m)^2 \varphi = E\varphi. \quad (2.18)$$

Se não houvessem bordas ao longo de q_1 , a solução seria dada em termos dos polinômios de Hermite, de modo que o espectro seria dado por

$$\begin{aligned} E_n(k_2) &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right) \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \sqrt{1 - \left(\frac{\hbar k_2}{eB_3 R}\right)^2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para valores de campo magnético da ordem de $B_3 = 2$ T, o segundo termo dentro da raiz da Eq.(2.19) tende a zero, de modo que o espectro de energia tem um valor

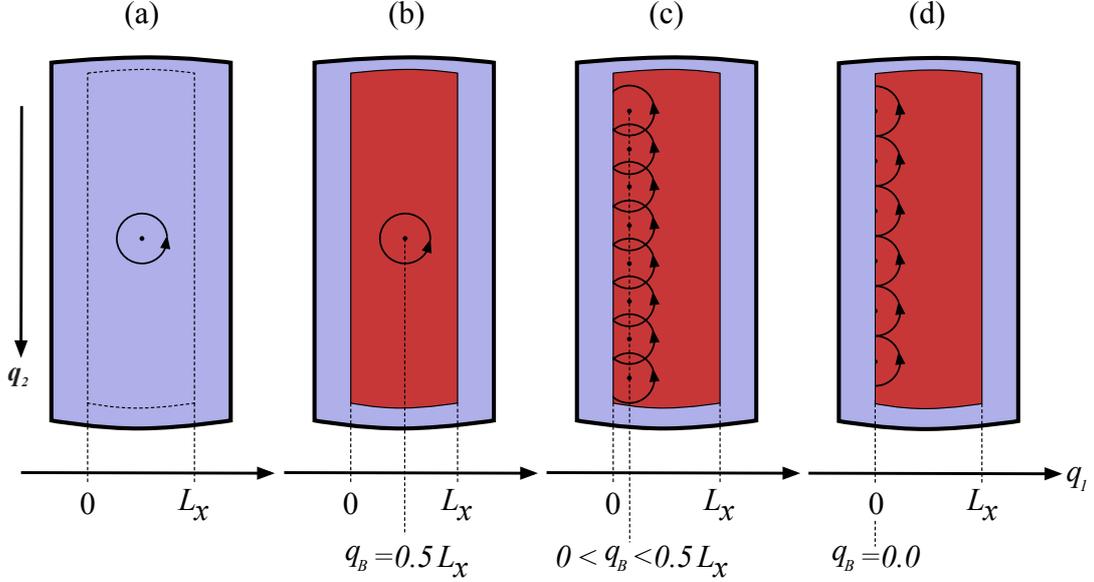


Figura 16: Vista superior da estrutura formada pela superfície S depositada sobre um tubo cilíndrico. A figura mostra as trajetórias clássicas de um elétron confinado na superfície curva sob a ação de um campo magnético com uma intensidade tal que o diâmetro da órbita ciclotrônica seja menor que a largura L_x . Em (a), vemos o comportamento do elétron livre de confinamento nas bordas; em (b) o elétron está confinado na superfície S e o campo está alinhado simetricamente em relação à mesma ($q_B = 0.5L_x$); em (c) e (d), temos a mesma situação de (b), mas para uma inclinação intermediária de campo $0 < q_B < 0.5L_x$ e uma situação mais assimétrica $q_B = 0$, respectivamente.

aproximado de $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ e o elétron tem uma velocidade média

$$v_n(k_2) = \frac{\partial E_n(k_2)}{\hbar \partial k_2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_2} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \right] = 0. \quad (2.20)$$

Analisando este resultado classicamente, o elétron estaria se comportando como se estivesse descrevendo uma órbita ciclotrônica fixa, como mostrado na Fig.16 (a). Para $B_3 = 2$ T, o diâmetro da órbita ciclotrônica, igual a duas vezes o comprimento magnético, é da ordem de $2 \times 0.018 \mu\text{m} = 0.036 \mu\text{m}$, e a órbita está, na situação mais simétrica do campo em relação à superfície S de largura L_x maior que este diâmetro, totalmente dentro da região confinante, como visto na Fig.16 (b). Como podemos ver nas trajetórias das Figs.16 (c) e (d), o centro da órbita do elétron segue o ponto onde o campo magnético a corta perpendicularmente, de modo que, nas situações mais assimétricas, a órbita ciclotrônica pode ser interferida por qualquer uma das extremidades de S , causando *efeitos de borda* que alteram a velocidade do elétron ao longo da direção q_2 , sendo esta velocidade, portanto, dependente da direção do campo em relação à superfície de confinamento: quanto mais assimétrico o campo estiver em relação à superfície, maior será a velocidade média

do elétron na direção de q_2 , e na situação mais simétrica, essa velocidade média será nula.

Como a área S em consideração é limitada ao longo de q_1 , devemos levar em conta as condições de contorno nas extremidades $q_1 = 0$ e $q_1 = L_x$. Para isso, definimos uma variável adimensional

$$Z(q_1) = \sqrt{\frac{2eB_3}{\hbar} \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right)} (q_1 - q_m). \quad (2.21)$$

Com Z dado pela Eq.(2.21), temos que

$$\frac{d^2}{dq_1^2} = \frac{2eB_3}{\hbar} \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right) \frac{d^2}{dZ^2} \quad (2.22)$$

e a Eq.(2.18) pode ser reescrita como

$$-\hbar\omega' \frac{d^2\varphi}{dZ^2} + \frac{\hbar\omega'}{4} Z^2\varphi = E\varphi \quad (2.23)$$

ou

$$\frac{d^2\varphi}{dZ^2} - \left(\frac{Z^2}{4} + a\right)\varphi = 0, \quad (2.24)$$

onde $a = -E/\hbar\omega'$, com

$$\omega' = \omega \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right). \quad (2.25)$$

As soluções da Eq.(2.24) são escritas em termos das funções cilíndricas parabólicas $D_v(Z)$ [42] e são dadas por

$$\begin{aligned} U(a, Z) &= D_{-a-\frac{1}{2}}(Z) \\ V(a, Z) &= \frac{1}{\pi}\Gamma\left(a + \frac{1}{2}\right) \times \left[D_{-a-\frac{1}{2}}(-Z) + \sin(\pi a)D_{-a-\frac{1}{2}}(Z) \right], \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde Γ é a Função Gamma. Assim, a dependência da função de onda em q_1 é escrita como

$$\varphi(a, Z) = AU(a, Z) + BV(a, Z), \quad (2.27)$$

e as condições de contorno nas extremidades da faixa são $Z_1 = Z(0)$ (esquerda) e $Z_2 = Z(L_x)$ (direita). Fazendo $\varphi(a, Z_1) = \varphi(a, Z_2) = 0$, podemos escrever as equações resultantes em forma matricial

$$\begin{bmatrix} U(a, Z_1) & V(a, Z_1) \\ U(a, Z_2) & V(a, Z_2) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

A Eq.(2.28) só tem soluções diferentes da trivial se o determinante da matriz quadrada

for zero. Assim, obtemos

$$U(a, Z_1)V(a, Z_2) - V(a, Z_1)U(a, Z_2) = 0. \quad (2.29)$$

O conjunto de a_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) que satisfaz a Eq.(2.29) nos dá os níveis de energia $E_n(k_2)$, e o elétron confinado na superfície S terá uma velocidade média $v_n(k_2) = (1/\hbar)\partial E_n(k_2)/\partial k_2 \neq 0$ para os casos em que a direção do campo magnético em relação à superfície provoca efeitos de borda, como previsto nas Figs.16 (c) e (d).

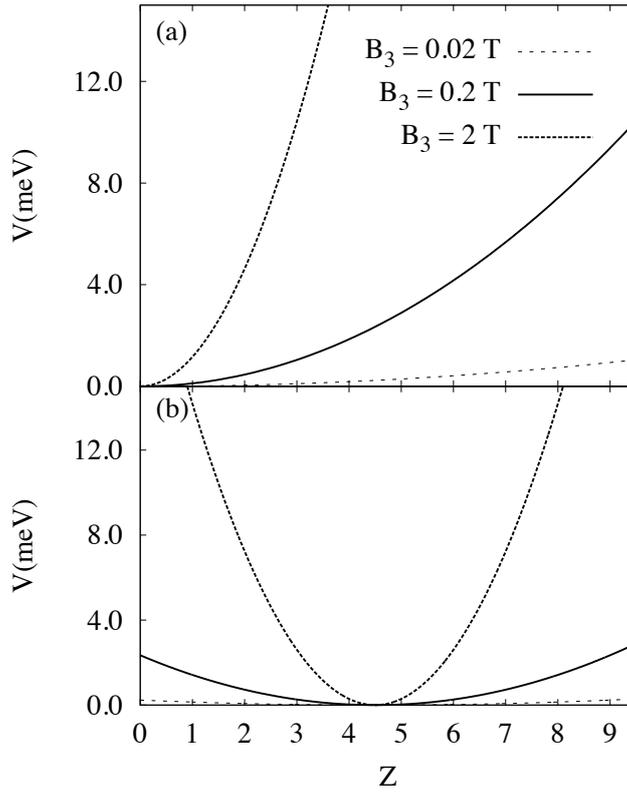


Figura 17: Potenciais efetivos para $k_2 = 0$ calculados em um sistema assimétrico (a) e simétrico (b) para diferentes valores de campo magnético.

De acordo com a Eq.(2.23), o potencial efetivo $V(Z)$ produzido pelo campo magnético é dado por

$$V(Z) = \frac{Z^2}{4} \hbar \omega \cos\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right), \quad (2.30)$$

e uma análise de $V(Z)$, representado nas Figs.17(a) e (b), mostra que à medida que o campo magnético aumenta (com valores de $B_3 = 0.02, 0.2$ e 2 T), há um maior confinamento do potencial em Z , o que torna o gás mais localizado no ponto onde o campo corta a superfície perpendicularmente. Além disso, a assimetria (a) e simetria (b) do campo magnético com a superfície fazem com que haja um deslocamento em Z do ponto mínimo

do potencial para a extremidade esquerda e para o centro do gráfico, respectivamente.

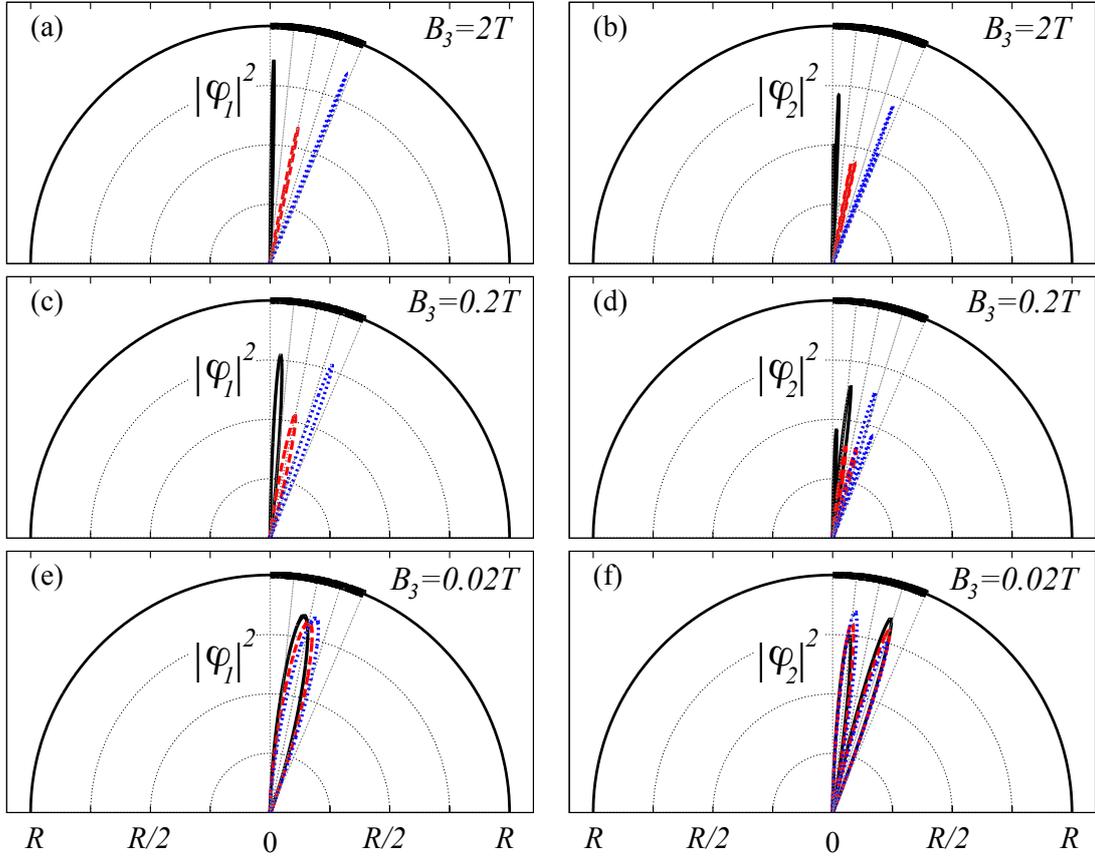


Figura 18: Gráficos polares das funções de onda $|\varphi_1|^2$ do estado fundamental e $|\varphi_2|^2$ do primeiro estado excitado para campos magnéticos $B_3 = 0.02, 0.2$ e 2 T nos casos assimétricos (linhas sólida e pontilhada) e simétrico (linha tracejada).

A Fig.18 mostra as curvas polares de densidade de probabilidade $|\varphi_n|^2$ com $k_2 = 0$ ao longo da superfície S (destacada em linha espessa na figura) para o estado fundamental ($n = 0$) e o primeiro estado excitado ($n = 1$). Os gráficos mostram resultados para valores de campo magnético $B_3 = 0.02, 0.2$ e 2 T nos casos em que a superfície está assimétrica (linhas sólidas e pontilhadas) e simétrica (linhas tracejadas) em relação a \vec{B} . Notamos um alinhamento das funções de onda de acordo com o mínimo do potencial efetivo mostrado na Fig.17: nos casos assimétricos, as funções estão alinhadas com as extremidades de S , e no caso simétrico, a função está localizada ao centro da superfície confinante. Também observamos que, ao aumentarmos o valor do campo magnético, notamos um aumento significativo no confinamento da função de onda, tornando-se cada vez mais bem localizada ao longo de q_1 , o que faz com que o elétron fique mais confinado

em torno da região de mínimo do potencial efetivo produzido pelo campo. Portanto, as variações no módulo do campo magnético e na posição da superfície em relação a \vec{B} modificam completamente as propriedades físicas do sistema, como veremos a seguir no cálculo da densidade de estados, potencial químico e calor específico. Na aproximação usada neste trabalho ($q_1 \ll R$), não há variação considerável no mínimo do potencial q_m ao modificarmos o valor do raio R do cilindro em alguns micrômetros. Testes feitos mostraram que, ao variarmos o raio de $R = 1 \mu\text{m}$ para $R = 2 \mu\text{m}$, o mínimo do potencial é deslocado em torno de $2 \times 10^{-4} \mu\text{m}$ (para $k_2 = 400 \mu\text{m}^{-1}$) e $4.6 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ (para $k_2 = 1000 \mu\text{m}^{-1}$). Além disso, a diferença nos cossenos da Eq.(2.30) é no máximo em torno de 10^{-2} , o que não muda muito a intensidade de $V(Z)$ com a variação de R .

2.3 Densidade de Estados, Potencial Químico e Calor Específico

Com o espectro de energia $E_n(k_2)$ em mãos, a densidade de estados (DOS) pode ser calculada como [43]

$$DOS(E) = \sum_{n,k_2} \delta(E - E_n(k_2)). \quad (2.31)$$

Em sistemas reais, observamos espalhamentos devido a impurezas, rugosidades nas interfaces e outros tipos de efeitos. Tal desordem causa um alargamento nos níveis de Landau, e nesse caso podemos substituir as funções delta da Eq.(2.31) por Gaussianas com largura γ [44, 45]

$$\delta(E - E_n(k_2)) \rightarrow \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}} e^{-(E - E_n(k_2))^2/2\gamma^2}. \quad (2.32)$$

A soma sobre k_2 foi substituída pela integral apropriada,

$$\sum_{k_2} (\dots) \rightarrow \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} \int_{\eta_i}^{\eta_f} (\dots) d\eta, \quad (2.33)$$

onde $\eta = q_0/L_x$ é uma variável adimensional com $q_0 = \hbar k_2/eB_3$, l_B é o comprimento magnético e L_y é a largura da região ao longo de q_2 . No limite de altos valores de campo magnético ($l_B \ll R$), as energias calculadas quando q_m estiver fora da região da superfície contribuirão muito pouco para a densidade de estados, de modo que podemos limitar q_0 para que q_m varie de 0 a L_x , que é a região da superfície. Usando a definição de $\eta = q_0/L_x$ junto com a Eq.(2.16), escrevemos

$$\eta = \frac{R}{L_x} \sin\left(\frac{q_m - q_B}{R}\right) \quad (2.34)$$

e assim os limites em η serão dados por

$$\eta_i = \frac{R}{L_x} \sin\left(-\frac{q_B}{R}\right) \quad (2.35)$$

e

$$\eta_f = \frac{R}{L_x} \sin\left(\frac{L_x - q_B}{R}\right), \quad (2.36)$$

que representam os pontos onde $q_m = 0$ e $q_m = L_x$, respectivamente. Assim, a densidade de estados por unidade de área é dada por

$$DOS(E) = \frac{1}{\gamma(2\pi)^{3/2}l_B^2} \sum_n \int_{\eta_i}^{\eta_f} e^{-\frac{[E-E_n(\eta)]^2}{2\gamma^2}} d\eta. \quad (2.37)$$

Devemos ressaltar que uma faixa cilíndrica na presença de um campo magnético contínuo perpendicular ao eixo de simetria, além de ter um confinamento devido às bordas, esta é confinada magneticamente. Na presença de campos magnéticos mais elevados, os elétrons ficam restritos a uma pequena região e somente sentirão os efeitos de borda se q_B tiver um valor próximo de 0 ou L_x . Por outro lado, a presença do campo magnético também modifica a simetria do sistema. Ele será completamente simétrico apenas quando $q_B = 0.5L_x$.

A Fig.19 mostra curvas de densidade de estados (DOS) variando com a inclinação q_B/L_x do campo magnético em relação à superfície para faixas curvas de raio $R = 1.0 \mu\text{m}$ com larguras $L_x = 0.3 \mu\text{m}$ (a) e $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ (b) calculadas a um campo $B_3 = 2 \text{ T}$. Estes resultados foram obtidos com $\gamma = 0.1 \text{ meV}$ e nós iremos usar este valor para todos os cálculos numéricos apresentados neste Capítulo. Observamos que na configuração simétrica ($q_B = 0.5L_x$), os picos da *DOS* são quase igualmente espaçados, sugerindo que para esta simetria e intensidade de campo, as bordas do sistema não contribuem para o confinamento das partículas. Entretanto, quando $q_B \neq 0.5L_x$, a simetria é perdida e na configuração mais assimétrica ($q_B = 0$ ou L_x) existem picos na mesma posição da configuração simétrica, mas a *DOS* mostra valores significativos entre eles. Este fato indica que a simetria / assimetria controlada externamente é responsável por mudanças na distribuição dos estados de energia acessíveis e, como consequência, podemos controlar externamente as propriedades físicas do sistema. Ilustramos este ponto calculando o potencial químico e o calor específico para sistemas com as mesmas configurações geométricas usadas no cálculo da *DOS*.

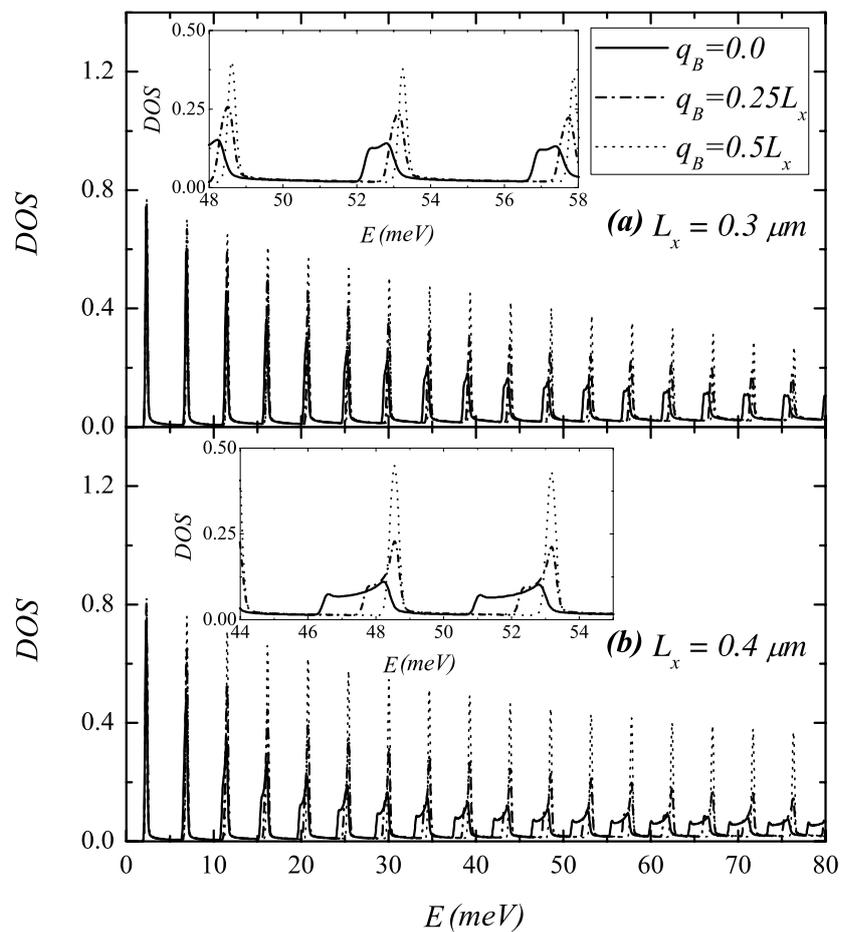


Figura 19: Densidade de estados (em unidades arbitrárias) para o gás de elétrons em uma faixa cilíndrica de raio $R = 1.0 \mu\text{m}$ na presença de um campo magnético $B_3 = 2T$ variando com a inclinação do campo magnético com relação à superfície $q_B/L_x = 0.0$, 0.25 e 0.5 para larguras $L_x = 0.3 \mu\text{m}$ (a) e $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ (b). Os estados que surgem entre os picos do caso simétrico são consequência da assimetria introduzida pelo campo magnético.

O potencial químico pode ser calculado através do valor de μ que satisfaz a equação

$$n_S - \int_0^\infty DOS(E)F(E, \mu, T)dE = 0, \quad (2.38)$$

onde

$$F(E, \mu, T) = \frac{1}{1 + \exp [(E - \mu)/k_B T]} \quad (2.39)$$

é a função de Fermi, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Assumimos que a densidade eletrônica $n_S = 4.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, um valor típico para este tipo de sistema, para obter valores numéricos de $\mu(T)$.

A Fig.20 mostra gráficos 3D do potencial químico variando com o raio R e com a temperatura T para $L_x = 0.4 \text{ } \mu\text{m}$ e $B_3 = 2 \text{ T}$ nos casos onde o campo magnético \vec{B} está posicionado assimetricamente (a) e simetricamente (b) em relação à superfície. Ao reduzirmos o raio mantendo a largura L_x constante, existe um aumento da curvatura da faixa e, no caso mais assimétrico (a), o campo magnético efetivo produz confinamento em uma das extremidades da superfície, provocando efeitos de borda e criando novos picos da DOS a níveis de energia logo abaixo dos níveis de Landau (como visto na Fig.19(a)). A criação desses picos diminui a intensidade da DOS, aumentando o valor do potencial químico com a redução de R . Com o aumento do raio R a uma largura L_x constante, o sistema tende para o caso plano e portanto não haverá posição privilegiada para o campo magnético ao longo de q_1 , de modo que a componente efetiva de \vec{B} ao longo de q_1 tende a ter um valor constante independente da posição. Nesse caso, há o confinamento magnético ao longo de toda a superfície e os elétrons se confinam em torno do centro $q_1 = L_x/2$, reduzindo os efeitos de borda e, mesmo no caso mais assimétrico, tendendo para o caso simétrico, onde não existem tais efeitos. No intervalo de $R = 0.8 \text{ } \mu\text{m}$ até $R = 1.0 \text{ } \mu\text{m}$, picos assimétricos tendem a ficar mais separados dos níveis de Landau (níveis simétricos), causando assim uma redução no valor do potencial químico à medida que o raio desta diminui. Na situação de total simetria de \vec{B} em relação à superfície ($q_B/L_x = 0.5$), o campo magnético efetivo do sistema varia menos ao longo de q_1 do que na situação mais assimétrica ($q_B/L_x = 0$), e quase não há mudanças no comportamento do potencial químico com a variação de R (Fig.20(b)).

O comportamento do potencial químico com a temperatura dependerá diretamente do número de estados acessíveis com energias logo abaixo da energia de Fermi. Se a DOS for crescente em $E = E_F$, haverá mais estados a serem preenchidos a energias logo acima da energia de Fermi E_F , o que faz com que o potencial químico seja decrescente com a temperatura. Este comportamento pode ser visto na Fig.20(a) para valores de R entre

0.8 e 1.2 μm . Além disso, se a DOS for crescente em $E = E_F$, menos estados serão acessíveis acima do nível de Fermi, fazendo com que o potencial químico seja crescente com a temperatura, como pode ser visto na Fig.20(a) para valores de R acima 1.5 μm e na Fig.20(b) para todos os valores de R . A Fig.21 mostra curvas de potencial químico variando com a temperatura T e com B_3 para $R = 1 \mu\text{m}$, $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ nos casos onde $q_B = 0$ (a) e $q_B = 0.5L_x$ (b). À medida em que variamos o campo magnético B_3 , há uma variação também no espaçamento entre os níveis da DOS, movendo estes picos e fazendo com que o potencial químico tenha um comportamento oscilatório ao longo de B_3 . A variação do potencial químico da Fig.21 com a temperatura é semelhante à da Fig.20, sendo crescente (ou decrescente) com T se a derivada da DOS em relação à energia em $E = E_F$ for menor (ou maior) que zero.

Nossa análise é concluída com o estudo do calor específico. Para isso, usamos os valores de $\mu(T)$ e $DOS(E)$ obtidos anteriormente para calcular a energia interna [46],

$$U = \int_0^{\infty} DOS(E)F(E, \mu, T)EdE. \quad (2.40)$$

Da primeira lei da termodinâmica, o calor específico a volume V constante é dado por

$$C_V(T) = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (2.41)$$

onde U é dado pela Eq.(2.40) e T é a temperatura. Assim

$$C_V(T) = \int_0^{\infty} EDOS(E) \left(\frac{\partial F(E, \mu, T)}{\partial T} \right)_V dE, \quad (2.42)$$

onde usamos o fato de que, a volume constante, a energia E e a $DOS(E)$ não variam com a temperatura. A função de Fermi $F(E, \mu, T)$ é definida pela Eq.(2.39), e sua derivada em relação a T é

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{1}{4k_B} \left(\frac{E - \mu}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{d\mu}{dT} \right) \text{sech}^2 \left(\frac{E - \mu}{2k_B T} \right), \quad (2.43)$$

de modo que

$$C_V(T) = \frac{1}{4k_B} \int_0^{\infty} EDOS(E) \left(\frac{E - \mu}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{d\mu}{dT} \right) \text{sech}^2 \left(\frac{E - \mu}{2k_B T} \right) dE. \quad (2.44)$$

A Fig.22 mostra curvas do quadrado da secante hiperbólica usada no cálculo do calor específico na Eq.(2.44) para um raio $R = 1 \mu\text{m}$ e três valores de temperatura $T = 1, 3$ e 5 K nos casos em que o campo magnético está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície S . Esta função possui um máximo quando a energia é igual ao valor do

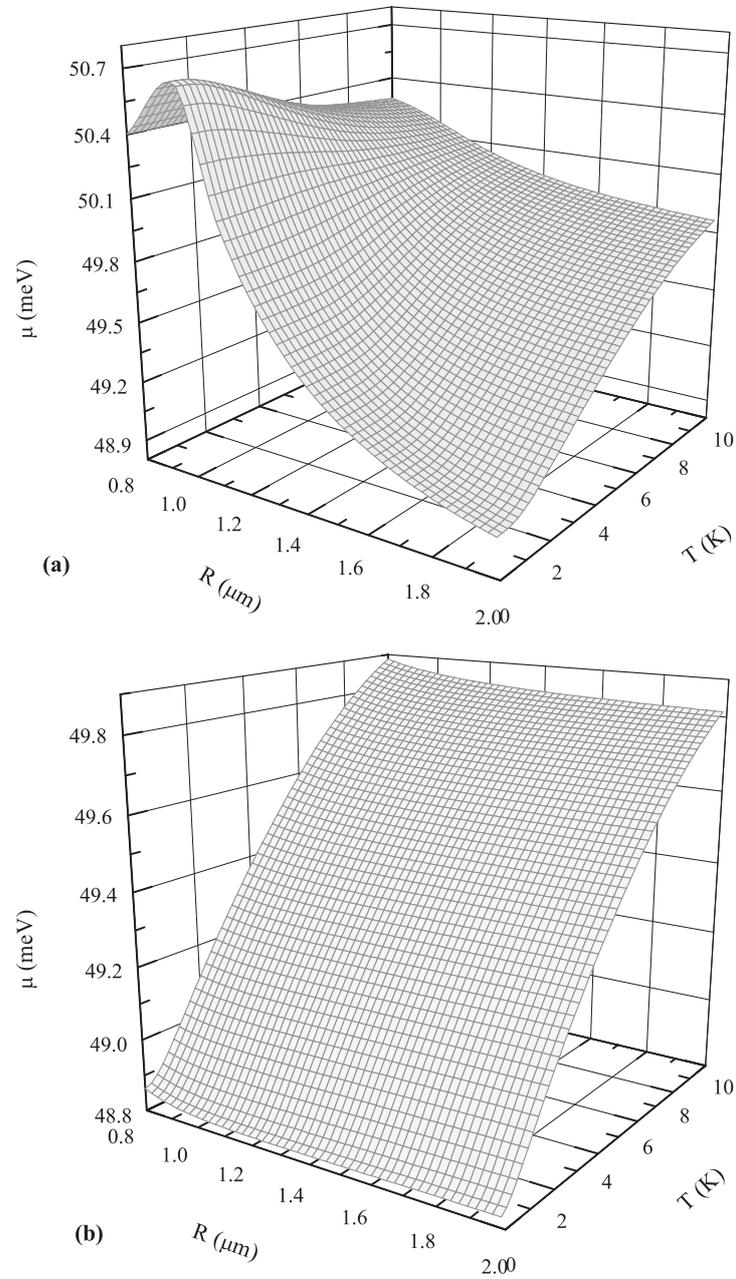


Figura 20: Curvas de potencial químico variando com o raio R e com a temperatura T para uma faixa cilíndrica de largura $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ com $B_3 = 2 \text{ T}$ nos casos em que o campo magnético é assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.

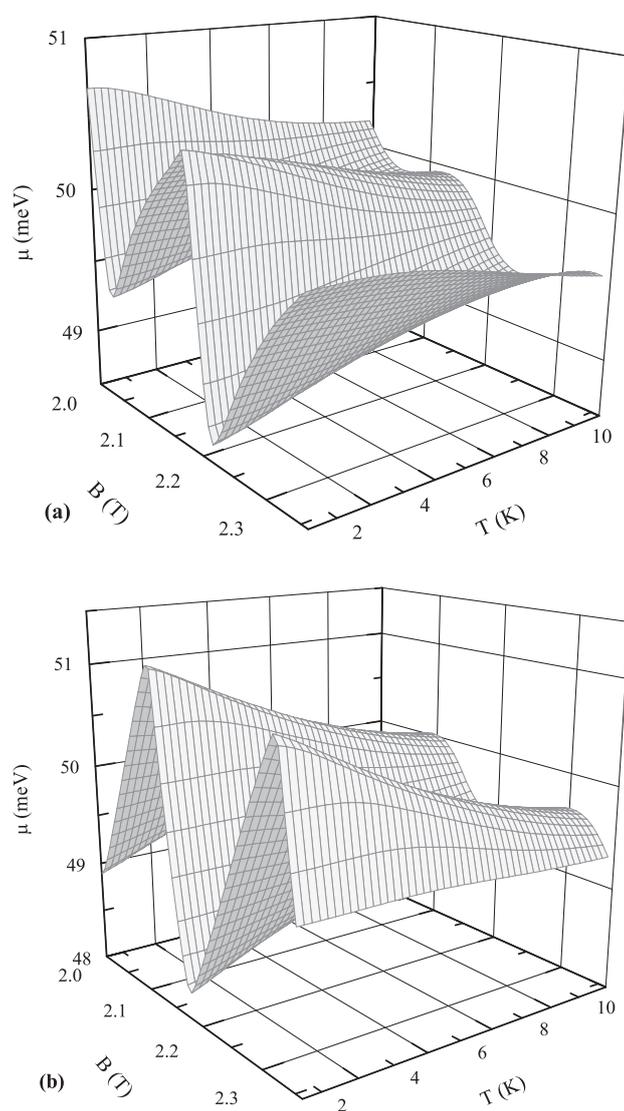


Figura 21: Curvas de potencial químico para uma faixa curva de raio $R = 1 \mu\text{m}$ e com $L_x = 0.4 \mu\text{m}$, variando com a temperatura T e com B_3 para os casos em que o campo magnético é assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.

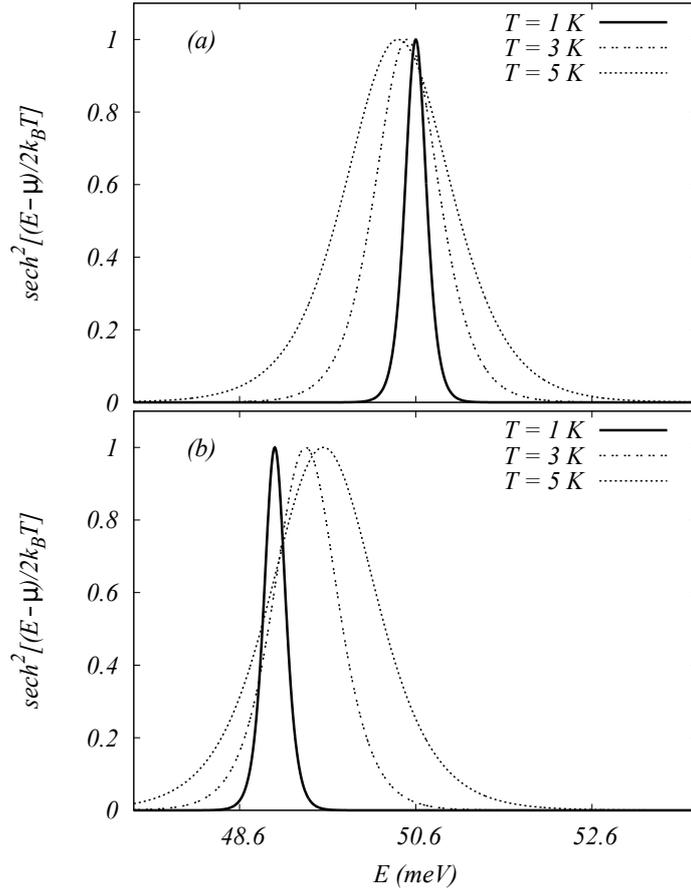


Figura 22: (a) Curvas de $\text{sech}^2[(E - \mu)/2k_B T]$ para $R = 1 \mu\text{m}$ nos casos em que a superfície está assimétrica (a) e simétrica (b) em relação ao campo magnético aplicado.

potencial químico ($E = \mu$), que varia de acordo com a temperatura do sistema, como visto nas Figs.20 e 21. Além disso, os picos ficam cada vez mais estreitos com a redução de temperatura, sugerindo que a temperaturas mais baixas somente os valores de energia mais próximos de μ contribuirão efetivamente para o cálculo de C_V .

A Fig.23 mostra gráficos 3D de calor específico variando com o raio R e com a temperatura T para $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ e $B_3 = 2 \text{ T}$ nos casos onde o campo magnético \vec{B} está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície. A sensibilidade do sistema em relação à curvatura e à simetria controlada externamente é claramente observada. A Fig.24 mostra como o calor específico para $R = 1 \mu\text{m}$ e $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ varia com T e B_3 nos casos onde o campo magnético está com uma inclinação assimétrica (a) e simétrica (b) em relação à superfície. Como no gráfico do potencial químico da Fig.21, o calor específico tem um comportamento oscilatório com a variação de B_3 devido ao deslocamento dos picos da DOS. A variação do calor específico com a temperatura ocorre da mesma forma que na Fig.23. Portanto, semelhantemente à discussão da dependência do potencial

químico com a inclinação do campo magnético, o calor específico também é dependente da direção do campo magnético em relação à superfície.

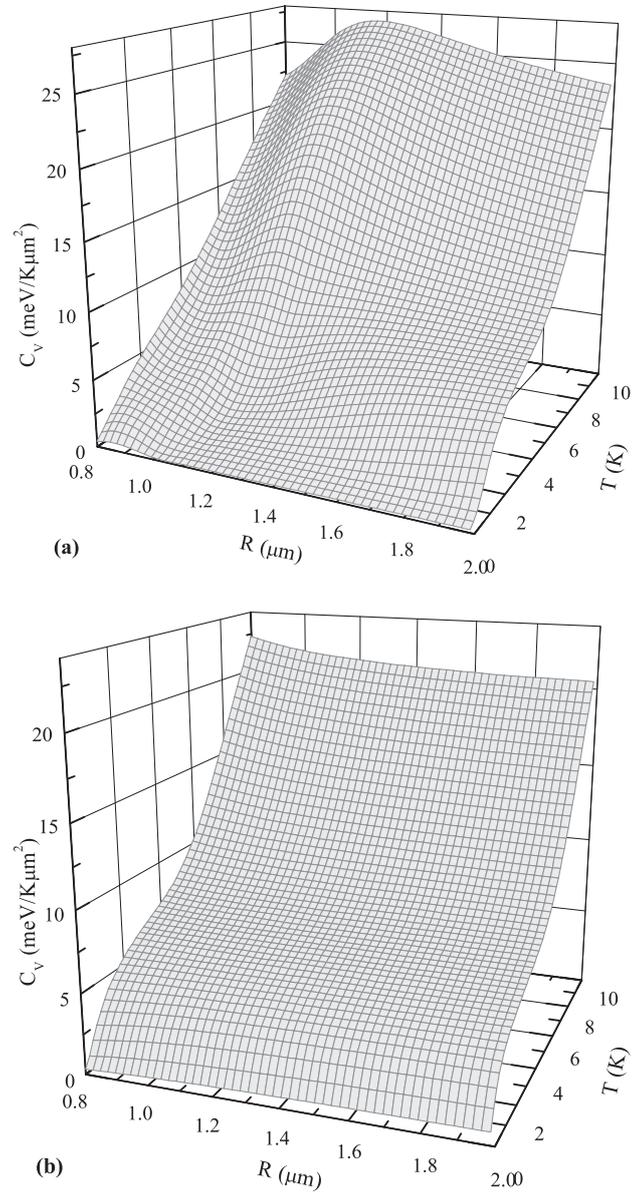


Figura 23: Curvas de calor específico variando com o raio R e com a temperatura T para uma faixa curva de largura $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ com $B_3 = 2 \text{ T}$, nos casos em que o campo magnético está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.

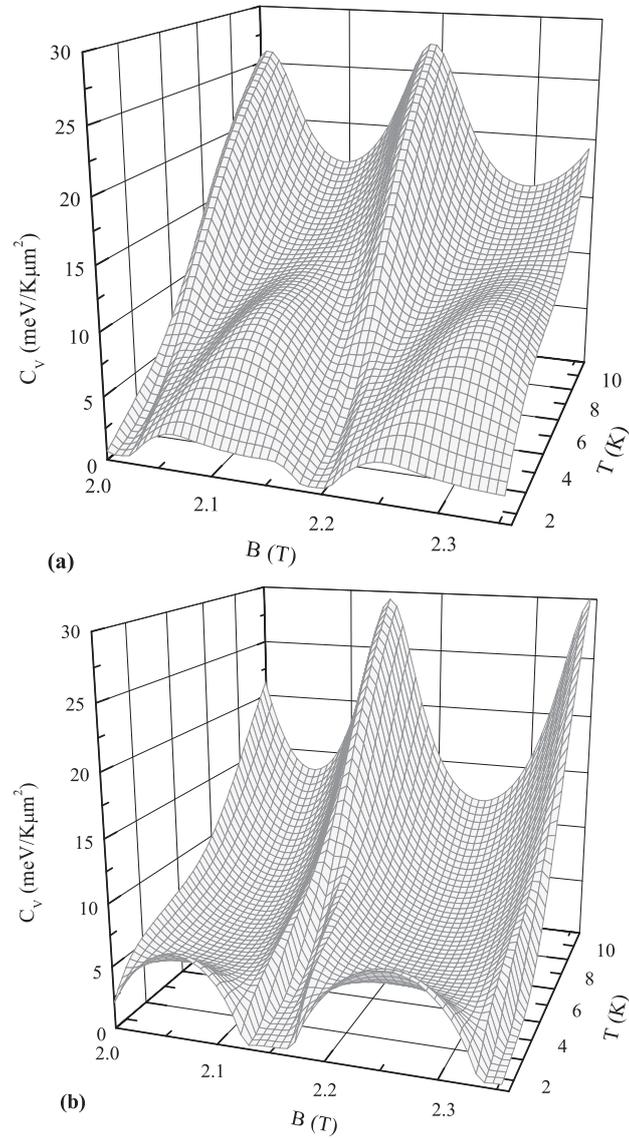


Figura 24: Curvas de calor específico para uma faixa curva de raio $R = 1 \mu\text{m}$ e com $L_x = 0.4 \mu\text{m}$, variando com T e B_3 nos casos em que o campo magnético está assimétrico (a) e simétrico (b) em relação à superfície.

3 *Propriedades Eletrônicas e de Transporte de Filmes Semicondutores com Deformações de Curvatura*

Neste Capítulo, investigamos as propriedades eletrônicas e de transporte de filmes semicondutores com curvaturas abruptas e suaves. Induzimos um confinamento através de um campo elétrico transversal externo aplicado, o que nos permite controlar algumas propriedades da estrutura de bandas, como os *gaps* de energia, através de um parâmetro externo ao sistema. Mostramos também que, para alguns valores de campo elétrico e amplitude do filme de curvatura suave, existem pontos em k_x onde são criadas bandas de Dirac, que fazem com que o *gap* se anule e a banda tenha um comportamento linear nas vizinhanças desse ponto. Também propagamos um pacote de onda ao longo dessas estruturas para demonstrar que as curvaturas das estruturas são responsáveis por transições significativas entre bandas.

3.1 Modelo Teórico

Consideramos dois diferentes sistemas que consistem em filmes semicondutores de espessura uniforme $w = 60 \text{ \AA}$, como mostrado na Fig. 25, onde a estrutura abrupta (a) é formada por uma região de curvatura constante de raio R se $-R \leq x \leq R$ e uma região de curvatura infinita (região plana) para outros valores de x , e a estrutura suave (b) é formada a partir de uma curva Gaussiana definida por $y = \alpha \exp(-x^2/\Gamma^2)$, onde α é a amplitude do filme curvo e $\Gamma = 130 \text{ \AA}$ é a largura da Gaussiana, a qual determina a largura da região curva. Além da suavidade, uma diferença fundamental entre estas duas estruturas está no fato de que, ao variarmos R , também mudamos o comprimento da região de curvatura finita no canal, enquanto que, no caso suave, ao variarmos α ,

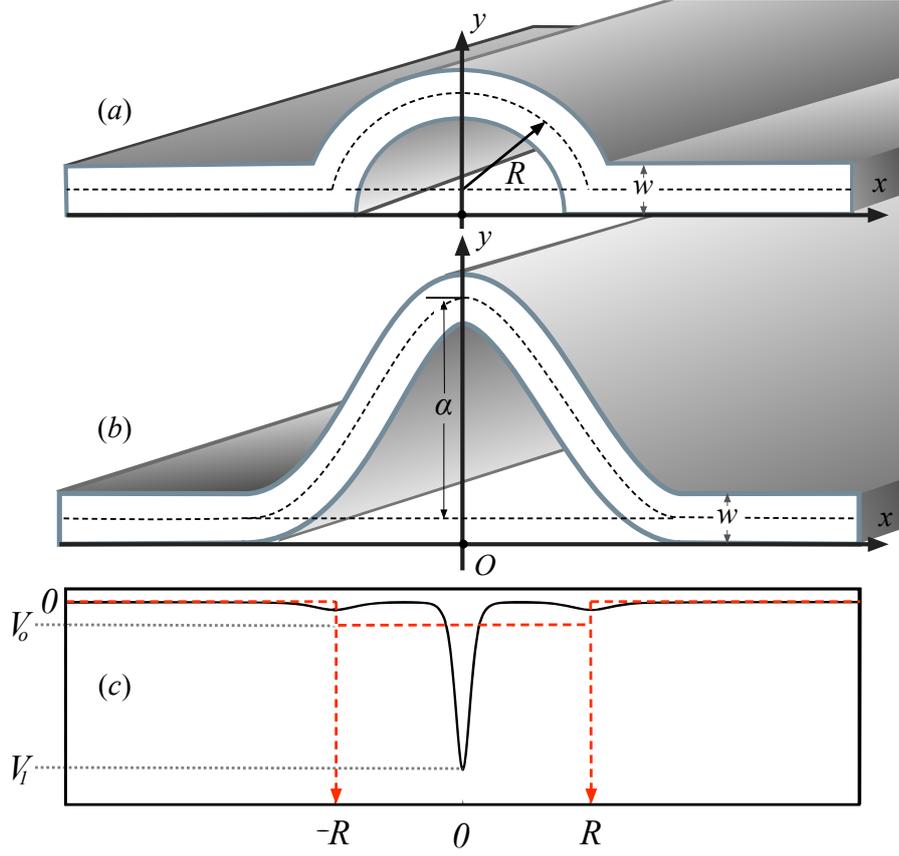


Figura 25: Esboço dos filmes curvos abrupto (a) e suave (b) de largura w sob investigação, com raio R e amplitude α , respectivamente. O potencial geométrico efetivo devido à curvatura é mostrado em (c) para as estruturas abrupta (linha tracejada) e suave (linha sólida), onde os valores mínimos $V_0 = -\hbar^2/8m_e R^2$, $V_1 = -\hbar^2 \kappa(0)^2/8m_e$ e $\kappa(x)$ é a curvatura dependente de x da estrutura suave. As setas tracejadas em $x = \pm R$ representam a descontinuidade no potencial efetivo devido à curvatura para o caso abrupto.

controlamos apenas a amplitude do canal, mantendo fixo o comprimento da região de curvatura finita ao longo do eixo x .

Estudamos a influência das curvas abrupta e suave sobre as propriedades eletrônicas e de transporte destes sistemas. Dentro da aproximação da massa efetiva, o Hamiltoniano para esse sistema é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + eFy + V(x, y) \quad (3.1)$$

onde m_e é a massa efetiva da partícula, k_z é o vetor de onda ao longo da direção z , e é a carga elementar, F é um campo elétrico aplicado ao longo da direção positiva do eixo y e o potencial $V(x, y)$ é zero dentro da camada semicondutora e $V(x, y) = 600$ meV fora. O confinamento eletrônico em uma fina camada curva dá origem ao já conhecido

potencial geométrico [51] devido à curvatura κ da estrutura, o qual é dado por $-\hbar^2\kappa^2/8m_e$ e desempenha um papel importante para as propriedades eletrônicas e de transporte do sistema (ver Apêndice B). Este potencial é qualitativamente representado na Fig.25 (c), onde as linhas tracejada e sólida mostram o potencial para os filmes abrupto (a) ($\kappa = 1/R$) e suave (b), respectivamente, com valores mínimos V_0 e V_1 . As setas verticais tracejadas representam o potencial efetivo criado pela mudança abrupta na curvatura em $x = \pm R$ para o filme circular. No caso abrupto, estes pontos se comportam como regiões com raio de curvatura $R \rightarrow 0$, que produzem divergências negativas no potencial efetivo induzido pela geometria da estrutura.

Primeiramente, estudamos as propriedades eletrônicas de uma super-rede formada por um potencial periódico ao longo de x criado a partir das estruturas mostradas na Fig.25 (a) e (b). A Equação de Schrödinger independente do tempo é resolvida numericamente, impondo a condição de periodicidade das funções de onda ao longo de x , para encontrarmos a estrutura de bandas dessa super-rede. Estudamos como essas energias mudam com a curvatura da estrutura e com um campo elétrico aplicado perpendicularmente. Em seguida, investigamos as propriedades de transporte de um pacote de onda injetado em uma das estruturas curvas da Fig.25 (a) e (b).

3.2 Propriedades Eletrônicas

Para encontrar as sub-bandas de energia de um elétron confinado em uma super-rede formada a partir das estruturas da Fig.25 (a) e (b), precisamos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo $H\psi = E\psi$ levando em conta as condições de periodicidade da função de onda ψ ao longo de x , onde H é dado pela Eq.(3.1), e a solução em z é uma onda plana com energias $\hbar^2k_z^2/2m_e$. Assumindo que $k_z = 0$ com uma largura de $w = 60 \text{ \AA}$ ao longo do eixo y , com uma diferença entre bandas (*band offset*) de $V_e = 600 \text{ meV}$, isto leva a energias de sub-bandas $E_n^{(y)} = 98, 368 \text{ e } 600 \text{ meV}$ para $n = 1, 2 \text{ e } 3$, respectivamente. Para $k_z \neq 0$, o pacote de onda descreverá um caminho mais longo através do filme e suas auto-energias sofrerão apenas um aumento (*shift*).

Com o intuito de obtermos os autoestados destes sistemas, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger independente do tempo no plano xy usando o método das diferenças finitas [52], enquanto que a direção z é analiticamente resolvida como uma onda plana.

3.2.1 Método de Diferenças Finitas

A série de Taylor de uma função $f(x)$ pode ser definida como

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{d^2f(x)}{dx^2}\Delta x^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 + \frac{1}{4!}\frac{d^4f(x)}{dx^4}\Delta x^4 + \dots, \quad (3.2)$$

ou, se trocarmos Δx por $-\Delta x$, temos

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \frac{df(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{d^2f(x)}{dx^2}\Delta x^2 - \frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 + \frac{1}{4!}\frac{d^4f(x)}{dx^4}\Delta x^4 + \dots \quad (3.3)$$

Subtraindo Eq.(3.3) de Eq.(3.2), obtemos

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \left(-\frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^2 - \frac{1}{5!}\frac{d^5f(x)}{dx^5}\Delta x^4 - \dots \right). \quad (3.4)$$

Assim, temos

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.5)$$

onde

$$\mathcal{O}(\Delta x^2) = -\frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^2 - \frac{1}{5!}\frac{d^5f(x)}{dx^5}\Delta x^4 - \dots \quad (3.6)$$

Se somarmos as Eqs.(3.2) e (3.3), obteremos

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \left(-\frac{2}{4!}\frac{d^4f(x)}{dx^4}\Delta x^2 - \frac{2}{6!}\frac{d^6f(x)}{dx^6}\Delta x^4 - \dots \right),$$

ou

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.7)$$

onde

$$\mathcal{O}(\Delta x^2) = -\frac{2}{4!}\frac{d^4f(x)}{dx^4}\Delta x^2 - \frac{2}{6!}\frac{d^6f(x)}{dx^6}\Delta x^4 - \dots \quad (3.8)$$

Para resolvermos numericamente o problema de uma função de onda $\psi(x, y)$ em duas dimensões, podemos generalizar o resultado da Eq.(3.7) desprezando os termos acima da segunda ordem

$$\frac{d^2\psi(x, y)}{dx^2} = \frac{\psi(x + \Delta x, y) - 2\psi(x, y) + \psi(x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} \quad (3.9)$$

e

$$\frac{d^2\psi(x, y)}{dy^2} = \frac{\psi(x, y + \Delta y) - 2\psi(x, y) + \psi(x, y - \Delta y)}{\Delta y^2}. \quad (3.10)$$

Podemos dividir o plano xy em uma rede de índices i, j com n_x e n_y pontos nas direções x e y , respectivamente, para encontrar as derivadas de segunda ordem da função de onda

bidimensional $\psi_{i,j}$ de acordo com as Eqs.(3.9) e (3.10)

$$\frac{d^2\psi_{i,j}}{dx^2} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad (3.11)$$

e

$$\frac{d^2\psi_{i,j}}{dy^2} = \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta y^2}. \quad (3.12)$$

Substituindo as Eqs.(3.11) e (3.12) na Eq.(3.1) e fazendo $k_z = 0$, obtemos

$$\psi_{i,j}A_{i,j} + \psi_{i+1,j}B + \psi_{i-1,j}B + \psi_{i,j+1}C + \psi_{i,j-1}C = E\psi_{i,j}, \quad (3.13)$$

com

$$A_{i,j} = \frac{\hbar^2}{m_e\Delta x^2} + \frac{\hbar^2}{m_e\Delta y^2} + V_{i,j} + eFy_j, \quad (3.14)$$

$$B = -\frac{\hbar^2}{2m_e\Delta x^2}, C = -\frac{\hbar^2}{2m_e\Delta y^2}, \quad (3.15)$$

onde Δx e Δy são os passos no eixo x e y , respectivamente. Para

$$\psi = (\psi_{1,1}, \dots, \psi_{1,n_y}, \dots, \psi_{n_x,1}, \dots, \psi_{n_x,n_y}), \quad (3.16)$$

a Eq.3.13 resulta em uma equação de autovalor

$$\mathcal{M}\psi = E\psi, \quad (3.17)$$

onde

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} A_{1,1} & B & 0 & \dots & C & 0 & 0 \\ B & A_{1,2} & B & \dots & 0 & C & 0 \\ 0 & B & \ddots & \ddots & 0 & 0 & C \\ \vdots & \vdots & \ddots & A_{1,n_y} & B & 0 & 0 \\ C & 0 & 0 & B & A_{2,1} & \ddots & 0 \\ 0 & C & 0 & 0 & \ddots & \ddots & B \\ 0 & 0 & C & 0 & 0 & B & A_{n_x,n_y} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

é uma matriz penta-diagonal operando em ψ , a qual pode ser usada para calcular as auto-energias E da estrutura. Assumindo uma sequência periódica de regiões curvas no plano semiconductor, calculamos a estrutura de bandas de energia introduzindo o vetor de onda k_x em termos de um deslocamento espacial ao longo da direção x , resultando em uma condição periódica $\psi_{1,j} = e^{-ik_x W_x} \psi_{n_x,j}$ e $\psi_{n_x,j} = e^{+ik_x W_x} \psi_{1,j}$, de modo que os termos com índices $i = 1$ e $j = 1, 2, \dots, n_y$ formarão uma diagonal na parte inferior esquerda da

matriz com valores $e^{-ik_x W_x}$ e os termos com índices $i = n_x$ e $j = 1, 2, \dots, n_y$ formarão uma diagonal na parte superior direita da matriz com valores $e^{ik_x W_x}$, onde a largura do sistema ao longo da direção x é tomada como $W_x = 700 \text{ \AA}$. [53]. A matriz resultante é diagonalizada numericamente, retornando as auto-energias $E_n(k_x)$ e as auto-funções $\psi_n(k_x)$.

3.3 Propriedades de Transporte

Com o objetivo de calcular as propriedades de transporte de filmes semicondutores em termos de suas curvaturas, injetamos um pacote de onda Gaussiano propagando-se no sentido positivo de x , definido por

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + ik_x^i x\right] \phi_n(y) \quad (3.19)$$

partindo da extremidade esquerda do filme, a saber, escolhemos $x_0 = 500 \text{ \AA}$ distante da extremidade esquerda da região de curvatura positiva. Aqui, $\sigma = 200 \text{ \AA}$ é a largura da Gaussianana na direção de x , $\phi_n(y)$ é a função de onda do n -ésimo auto-estado na direção de y (confinamento no plano) e $k_x^i = \sqrt{2m_e \varepsilon_i / \hbar^2}$, onde ε_i é a energia cinética inicial do pacote. No espaço recíproco, o quadrado da função de onda também é uma Gaussiana, mas com uma largura proporcional a $1/\sigma$, a qual dá uma incerteza de $\Delta E \sim 72, 90$ e 108 meV para o primeiro, segundo e terceiro níveis de energia ao longo do eixo x (para k_x^i , $i = 1, 2, 3$, respectivamente), os quais são valores razoáveis para este trabalho. [54]

O pacote, inicialmente livre nas direções x e z e confinado na direção y , tem energias de sub-banda dadas por

$$E_n(k_x) = E_n^{(y)} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_z^2)}{2m_e}, \quad (3.20)$$

onde $E_n^{(y)}$ são as energias do confinamento na direção y e o pacote inicia o transporte a partir do estado fundamental $E_1^{(y)}$; k_x e k_z são os vetores de onda ao longo de x e z , respectivamente. A Fig.26 mostra esquematicamente as sub-bandas de energia dadas pela Eq.(3.20), assumindo $k_z = 0$. Vemos que, se o pacote tem energia inicial ε_i e parte do estado fundamental ($n = 1$), ele tem um vetor de onda $k_x = \pm k_1$. Ao longo da trajetória percorrida pelo pacote, o mesmo pode sofrer espalhamentos para outras sub-bandas, modificando seu vetor de onda para $k_x = \pm k_2$ na segunda sub-banda ($n = 2$) e $k_x = \pm k_3$ na terceira sub-banda ($n = 3$). Também é importante dizer que, para diferentes

valores de k_x , a velocidade média $v_n(k_x)$ do pacote terá diferentes valores dados por

$$v_n(k_x) = \frac{\partial E_n(k_x)}{\hbar \partial k_x}, \quad (3.21)$$

de modo que a parte do pacote espalhada na segunda sub-banda se desloca com velocidade $v_2(\pm k_2)$ inferior à da parte da função no estado fundamental $v_1(\pm k_1)$ e assim por diante, ou seja:

$$v_1(\pm k_1) > v_2(\pm k_2) > v_3(\pm k_3). \quad (3.22)$$

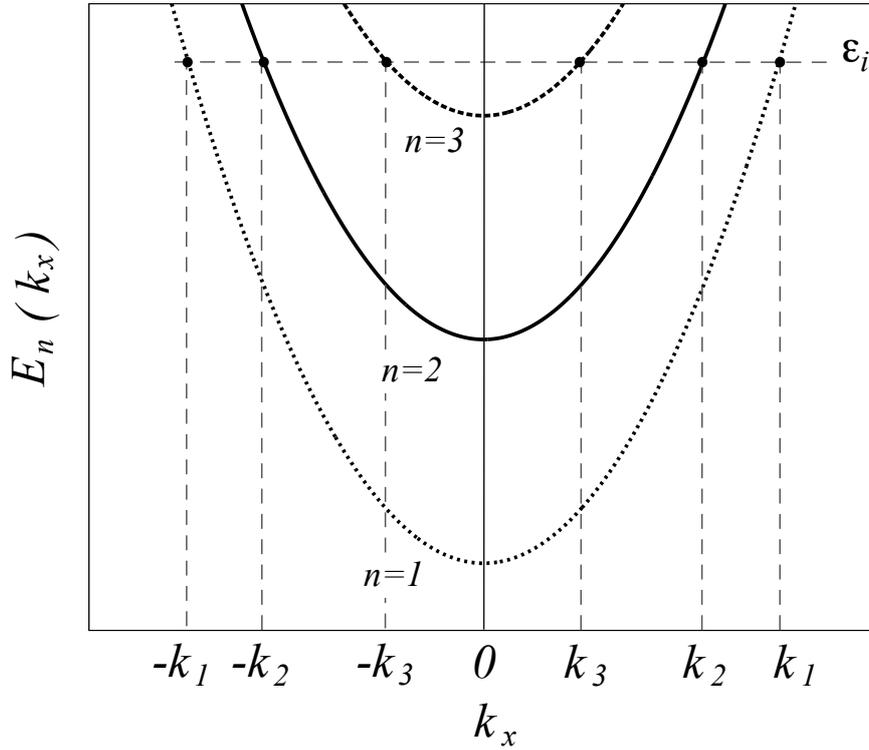


Figura 26: Bandas de energia para um elétron livre na direção x e confinado na direção y , com energia cinética média inicial ε_i . No estado fundamental ($n = 1$), isto equivale a um elétron que se move com vetor de onda $k_x = k_1$ (ou $k_x = -k_1$), podendo ser espalhado para outras sub-bandas de energia, como $n = 2$, onde o vetor de onda $k_x = \pm k_2$ ou $n = 3$, com $k_x = \pm k_3$.

Para encontrar a evolução temporal do pacote de onda e as probabilidades de transmissão e reflexão nos casos em que a estrutura tem curvatura abrupta e suave, aplicamos a técnica do split-operator [56], que consiste em um método numérico para a resolução da equação de Schrödinger dependente do tempo.

3.3.1 O Método Split-Operator

A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.23)$$

tem como solução a relação

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t \right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.24)$$

a partir da qual, conhecendo-se o Hamiltoniano que descreve o sistema, podemos fazer a evolução temporal de um pacote de onda inicial. Para isso, separamos o Hamiltoniano em suas partes cinética \hat{T} e potencial \hat{V} . Como \hat{T} e \hat{V} são dois operadores que não comutam entre si, podemos reescrever a exponencial da Eq.(3.24) de uma forma aproximada, assumindo $\Delta t = 0.2$ fs e desprezando os termos de ordem Δt^3 [47]

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t \right] = \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \hat{V} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{T} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \hat{V} \Delta t \right], \quad (3.25)$$

obtendo assim a relação entre as funções de onda anterior e posterior ao intervalo de tempo Δt ,

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \hat{V} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{T} \Delta t \right] \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \hat{V} \Delta t \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.26)$$

Como os termos de exponencial do potencial não envolvem derivadas, podemos multiplicá-los ponto a ponto pela função de onda. Devido ao fato de as energias cinéticas de cada direção T_x , T_y e T_z comutarem entre si, na ausência de campos magnéticos fazemos $\exp[\hat{T}] = \exp[\hat{T}_x] \exp[\hat{T}_y] \exp[\hat{T}_z]$ de forma exata na Eq.(3.26). Discretizamos o espaço, o potencial V , a função de onda $\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi_i\rangle_t$ e fazemos a multiplicação ponto a ponto da função de onda inicial pela exponencial dependente de \hat{V} , de onde obtemos

$$\xi_i = \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} V_i \Delta t \right] |\Psi_i\rangle_t. \quad (3.27)$$

Em seguida, devemos multiplicar a exponencial do termo cinético por ξ_i da Eq.(3.27). Para isso, podemos usar a forma de Cayley da exponencial [48], obtendo

$$\eta_i = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{T} \Delta t \right] \xi_i = \left(\frac{1 + \frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t}{1 - \frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t} \right) \xi_i \quad (3.28)$$

ou, escrevendo de outra forma,

$$\left(1 - \frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right)\eta_i = \left(1 + \frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right)\xi_i, \quad (3.29)$$

onde a energia cinética T , na ausência de campos magnéticos, é dada por

$$T_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_n^2}, \quad (3.30)$$

sendo m a massa da partícula e x_n uma das variáveis espaciais. Usando o método de Crank-Nicolson, discretizamos as derivadas para chegarmos a uma equação matricial equivalente à Eq.(3.29)

$$\begin{pmatrix} B & A & 0 & 0 & 0 \\ A & B & A & 0 & 0 \\ 0 & A & B & A & 0 \\ 0 & 0 & A & B & A \\ 0 & 0 & 0 & A & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \eta_{i-1} \\ \eta_i \\ \eta_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B' & A' & 0 & 0 & 0 \\ A' & B' & A' & 0 & 0 \\ 0 & A' & B' & A' & 0 \\ 0 & 0 & A' & B' & A' \\ 0 & 0 & 0 & A' & B' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{i-1} \\ \xi_i \\ \xi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

onde Δx_n é o espaçamento entre os pontos de x_n . Os elementos de matriz A , A' , B e B' são dados por:

$$A = -\beta/\Delta x_n^2 \quad (3.32)$$

$$A' = \beta/\Delta x_n^2 \quad (3.33)$$

$$B = 1 + 2\beta/\Delta x_n^2 \quad (3.34)$$

$$B' = 1 - 2\beta/\Delta x_n^2 \quad (3.35)$$

com $\beta = i\hbar\Delta t/4m$. Resolvemos numericamente a Eq.(3.31) [49] para encontrar os elementos de matriz η_i . Podemos fazer a multiplicação ponto a ponto da primeira exponencial da Eq.(3.26) pelos elementos η_i encontrados no passo anterior, obtendo assim a função de onda no tempo $t + \Delta t$

$$|\Psi_i\rangle_{t+\Delta t} = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V_i\Delta t\right]\eta_i. \quad (3.36)$$

Quando houver mais de uma variável espacial, podemos repetir o procedimento das Eqs. (3.28) a (3.31) para a energia cinética em cada direção.

Com isso, estamos aptos a calcular algumas quantidades dependentes do tempo, como a corrente de probabilidade, e as probabilidades de transmissão e reflexão do pacote de onda que atravessa a estrutura.

3.3.2 Corrente de Probabilidade, Transmissão e Reflexão

Algumas propriedades físicas, como as probabilidades de transmissão T e reflexão R , podem ser extraídas das funções de onda propagadas no sistema. Estas podem ser calculadas integrando-se a componente da corrente de probabilidade na direção de propagação:

$$T = \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_R, y, t) dy dt \quad (3.37)$$

e

$$R = - \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_L, y, t) dy dt, \quad (3.38)$$

entre dois pontos fixos x_R e x_L , que se situam nas extremidades direita e esquerda, respectivamente, onde o sinal negativo em R significa que o pacote de onda se move em direção oposta através do ponto x_L , e a componente x da corrente de probabilidade é dada por

$$J_x(x, y, t) = -i \frac{\hbar}{2m_e} \left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right). \quad (3.39)$$

Para investigar a probabilidade de espalhamento de um pacote de onda que se encontra inicialmente no estado fundamental em diferentes sub-bandas devido à região curva, analisamos a contribuição de cada sub-banda sobre a corrente de probabilidade total, a qual é dada por

$$\langle J_x^{(j)} \rangle = \int_0^\infty dt J_x^{(j)}(x_r, t), \quad (3.40)$$

onde

$$J_x^{(j)}(x, t) = -i \frac{\hbar}{2m_e} \left(\bar{P}_j^* \frac{\partial}{\partial x} \bar{P}_j - \bar{P}_j \frac{\partial}{\partial x} \bar{P}_j^* \right), \quad (3.41)$$

é a contribuição dependente do tempo de cada sub-banda,

$$P_j(x_i, t) = \langle \Psi | \phi_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x_i, y, t) \phi_j(y) dy, \quad (3.42)$$

é a projeção da função de onda dependente do tempo sobre a j -ésima sub-banda, e $\bar{P}_j(x, t) = \langle \phi_j | \Psi \rangle$.

3.3.3 Condições de Contorno

Ao definirmos um espaço finito para resolver a equação de Schrödinger numericamente, impomos a existência de barreiras de potencial infinito nas extremidades do sistema, pois a função de onda é nula na região externa ao grid em questão. Isso pode não ser um problema em algumas situações, mas não no caso de uma evolução temporal, pois

há reflexões nas bordas do sistema que impedem que o pacote saia da região estudada. Pensando em alguns artifícios numéricos para solucionar esse problema, Manolopoulos *et al.* desenvolveram uma relação para um potencial imaginário ajustável que pode ser muito bem utilizado em nosso caso para reduzir ao máximo as reflexões nas bordas do sistema [50]. Este potencial depende apenas da direção de propagação, e é dado por

$$V_{im}(\bar{x}) = -iE_{min} \left(a\bar{x} - b\bar{x}^3 + \frac{4}{(c - \bar{x})^2} - \frac{4}{(c + \bar{x})^2} \right), \quad (3.43)$$

onde $a = 1 - 16/c^3$, $b = (1 - 17/c^3)/c^2$, $c = 2.62206$ e E_{min} é a menor energia do elétron, dada por

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{c}{2(x_2 - x_1)\delta} \right]^2 \quad (3.44)$$

para um potencial imaginário entre os pontos x_1 e x_2 . Em nossos cálculos, usamos o parâmetro $\delta = 0.2$, obtendo apenas pequenas reflexões em x_1 . A relação entre \bar{x} e x é dada por

$$\bar{x} = 2k_{min}\delta/(x - x_1), \quad (3.45)$$

com $k_{min} = \sqrt{2m_e E_{min}/\hbar^2}$. Em nosso sistema, construímos duas regiões de potencial imaginário nas bordas da direção x do sistema com larguras de 888.8 Å, que resulta em uma energia mínima $E_{min} = 3.1$ meV.

3.3.4 Obtendo Auto-Estados Através do Método Split-Operator

Se Δt tiver valor imaginário na Eq.(3.24), podemos escrever o operador evolução temporal como

$$\hat{U}(\Delta\tau) = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(\Delta\tau) \right], \quad (3.46)$$

onde $\Delta\tau = \tau - \tau_0$ é a variação no tempo imaginário. Se escrevermos a função de onda no instante inicial como

$$\Psi(\vec{r}, \tau_0) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{r}), \quad (3.47)$$

então

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \hat{U}(\Delta\tau) \Psi(\vec{r}, \tau_0) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(\tau - \tau_0) \right] \sum_n a_n \psi_n(\vec{r}) \\ &= \sum_n a_n \lim_{\tau \rightarrow \infty} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} E_n(\tau - \tau_0) \right] \psi_n(\vec{r}) \cong a_0 \exp \left[-\frac{1}{\hbar} E_0(\tau - \tau_0) \right] \psi_0(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Dessa forma, podemos concluir que

$$\psi_0(\vec{r}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\hat{U}(\Delta\tau)\Psi(\vec{r}, \tau_0)}{|\hat{U}(\Delta\tau)\Psi(\vec{r}, \tau_0)|}. \quad (3.49)$$

Assim, vemos que a função de onda inicial $\Psi(\vec{r}, t)$ evolui para a função de onda do estado fundamental $\psi_0(\vec{r})$ após passado um tempo imaginário suficientemente grande, desde que $a_0 = \langle \psi_0 | \Psi \rangle \neq 0$. [55, 56] Com isso, podemos encontrar outros auto-estados através do processo conhecido como ortonormalização de Gram-Schmidt. [57] Neste trabalho, entretanto, não utilizamos a evolução em tempo imaginário. Obtivemos os auto-estados através do método de diferenças finitas, aqui já discutido.

3.4 Resultados e Discussões

Aplicaremos agora o modelo teórico de filmes semicondutores curvos discutido na Seção anterior para estudar o espectro de energia e as propriedades de transporte dos filmes curvos representados na Fig. 25. Por simplicidade, consideramos filmes feitos de arseneto de gálio (GaAs), onde assumimos que a massa efetiva do elétron é dada por $m_e = 0.067m_0$.

3.4.1 Estrutura de Bandas

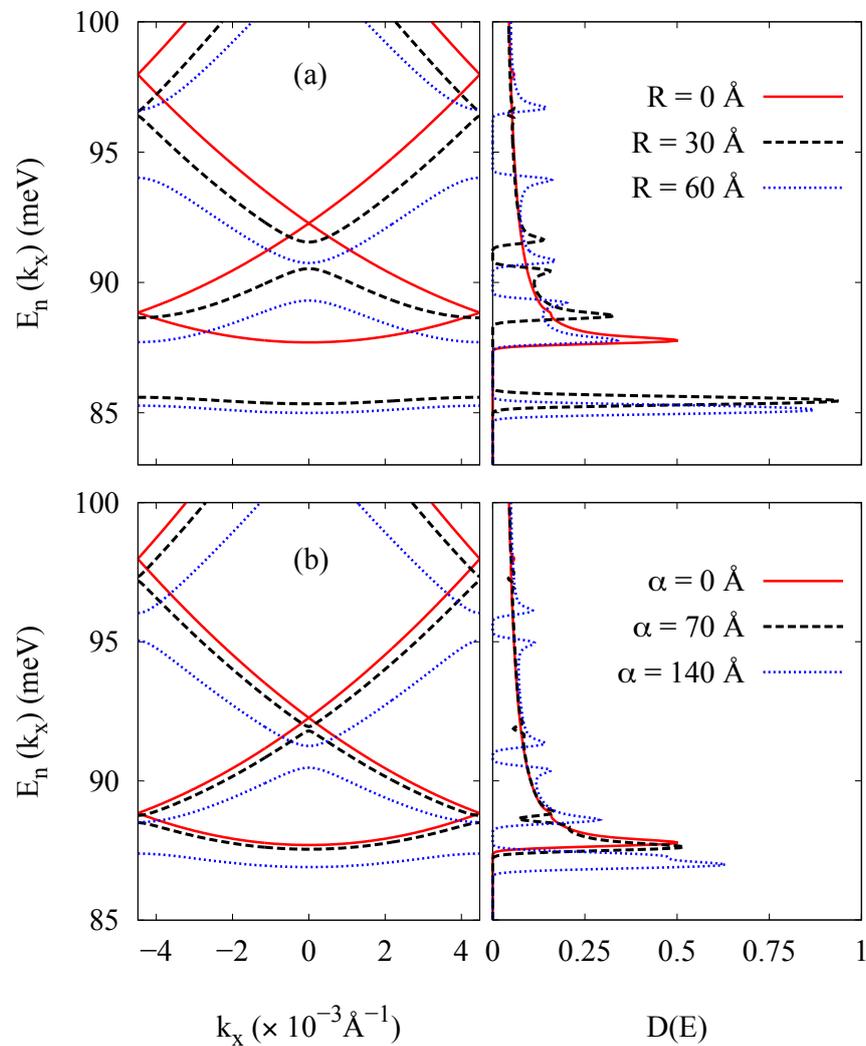


Figura 27: Estrutura de bandas e densidade de estados para filmes curvos, considerando (a) diferentes valores de raio do filme circular e (b) diferentes alturas do filme suave.

A Fig.27 mostra a estrutura de bandas $E_n(k_x) \times k_x$ e a densidade de estados $D(E)$ correspondente para diferentes valores de raio R , no caso abrupto (a), e a amplitude α , no caso suave (b). Os resultados para $R = \alpha = 0$ são para o caso de uma camada não-curva, os quais são mostrados aqui com a dispersão eletrônica na primeira zona de Brillouin, apenas para fins de comparação. Ao variarmos R , também variamos a largura da região de curvatura finita no canal. Por outro lado, ao variarmos α no caso suave, modificamos apenas a amplitude do canal, mantendo fixa a largura da região de curvatura finita ao longo do eixo x . Observamos que, à medida que o raio R aumenta, as bandas

se tornam mais suaves, os picos da densidade de estados se tornam mais intensos e mais bem localizados, e há um aumento no *gap de energia* entre elas, que é uma indicação de confinamento da partícula. O *gap* de energia entre as bandas aumenta mais rapidamente com a curvatura R no caso abrupto do que com a amplitude α no caso suave, isto é, há uma quebra da degenerescência dos estados $E_n(k_x = 0)$ à medida que a curvatura ou amplitude aumenta, e esta quebra é mais evidente no caso abrupto do que no caso suave, mostrando ser mais fácil confinar os elétrons na primeira situação. Como consequência, os picos de densidade de estados (lado direito da figura) tornam-se mais localizados, tendo valores mais altos de $D(E)$ e a separação entre os picos no caso abrupto (a) se torna mais evidente do que no caso suave (b).

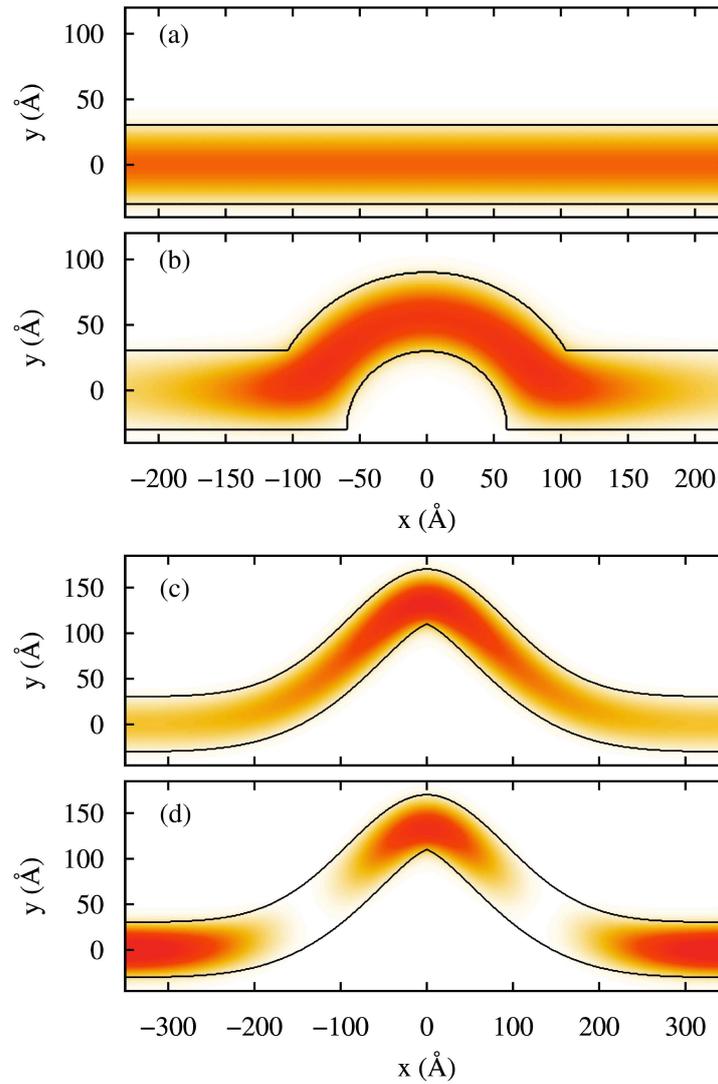


Figura 28: Gráficos de contorno do módulo quadrado das funções de onda do estado fundamental em $k_x = 0$ sem um campo elétrico aplicado considerando (a) um filme plano e (b) um filme com curvatura abrupta de raio $R = 60$ Å. Em (c) em em (d), vemos os mesmos tipos de curvas do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente, para o caso em que a estrutura tem uma curvatura suave em forma de uma Gaussiana de largura $\Gamma = 130$ Å e amplitude $\alpha = 140$ Å.

Verificamos o confinamento induzido pela curvatura mostrando na Fig.28 o módulo quadrado das funções de onda do estado fundamental para $n = 1$ e $k_x = 0$ em um filme plano (a), para o caso abrupto com $R = 60$ Å (b) e o estado fundamental (c) e o primeiro estado excitado (d) para o caso suave com amplitude $\alpha = 140$ Å. Como mencionamos anteriormente, o filme tem uma espessura uniforme, e como somos capazes de confinar um

elétron em torno de $x = 0$ apenas aumentando o raio R (no caso abrupto) ou a amplitude α (no caso suave), este confinamento é puramente quântico e está associado ao potencial devido à curvatura. Em (b), é evidente que a descontinuidade do potencial abrupto causa um maior confinamento nas junções dos planos com a região curva ao centro. Em (c) e em (d), criamos fios quânticos na direção z (perpendicular à figura), que é uma situação semelhante à do fio quântico *v-groove* discutido no capítulo introdutório.

Podemos aumentar ainda mais esse confinamento com o auxílio de um campo elétrico transversal \vec{F} aplicado na direção positiva de y . A Fig.29 mostra curvas de densidade de probabilidade do estado fundamental (a), (b) e (c) e do primeiro estado excitado (d) para as mesmas estruturas da Fig.28 com um campo elétrico aplicado de módulo $F = 20$ kV/cm. Em consequência deste campo, a função de onda se torna mais confinada ao centro da estrutura, como pode ser visto em (b), (c) e (d) comparado com o caso sem campo da Fig.28.

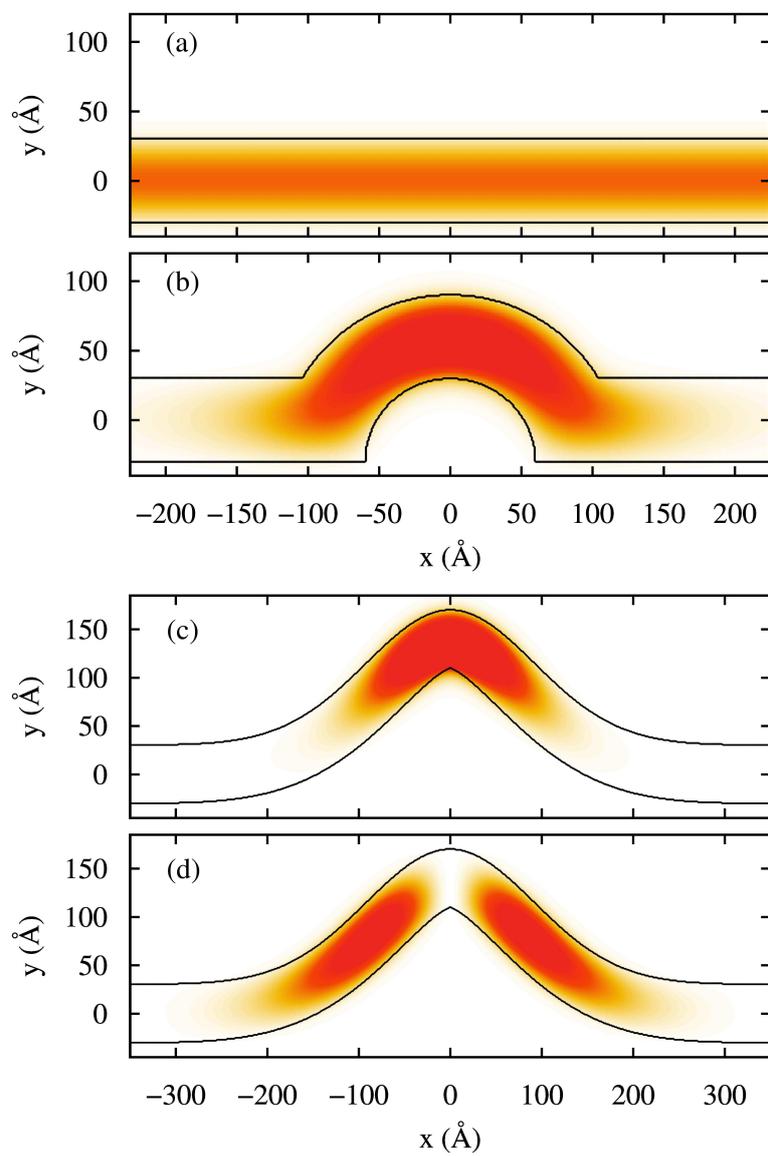


Figura 29: Os mesmos gráficos da Fig.28 para um campo elétrico $F = 20$ kV/cm aplicado na direção positiva de y .

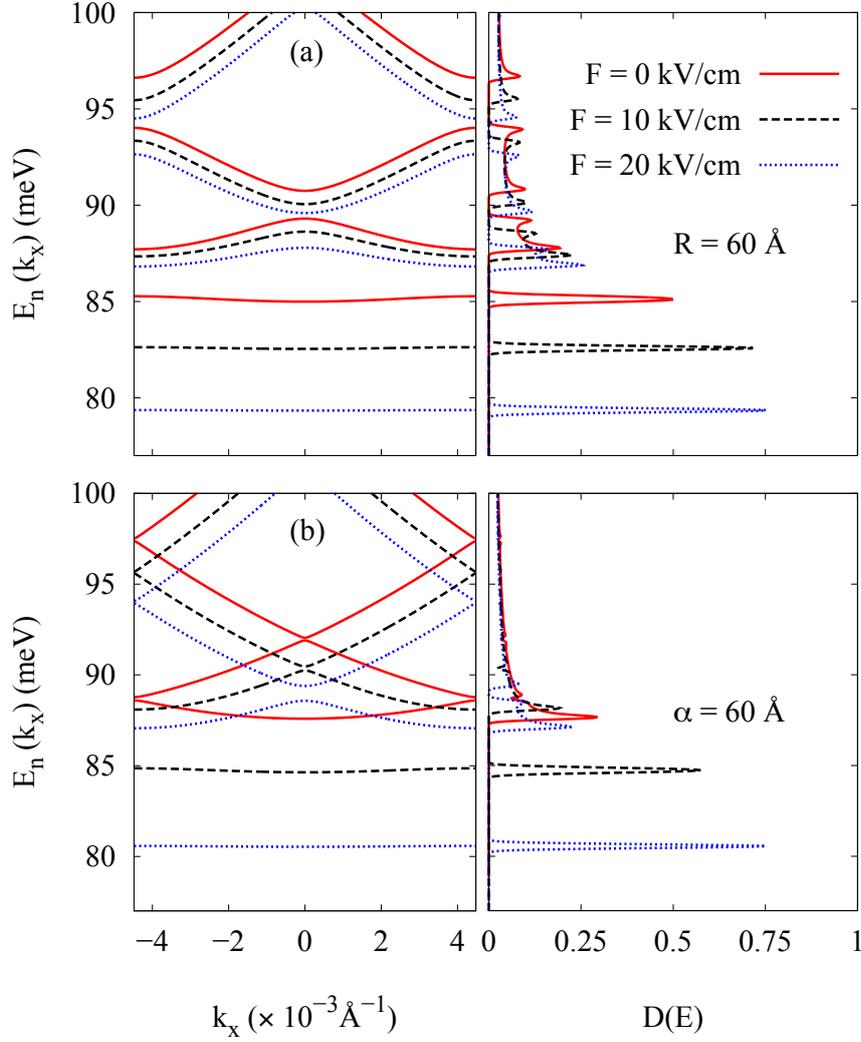


Figura 30: Estrutura de bandas (à esquerda) e densidade de estados (à direita) para filmes curvos (a) abrupto e (b) suave, considerando diferentes valores de campo elétrico externo.

Na Fig.30, vemos que mesmo para pequenos valores de curvatura, é possível forçar o confinamento eletrônico apenas aplicando um campo elétrico F transversal na direção positiva do eixo y . Aumentando o campo elétrico, as bandas se tornam mais suaves (lado esquerdo), o que significa que existe um pico maior e mais localizado de densidade de estados (lado direito), e a partícula fica mais confinada. Novamente, o aumento dos *gaps* e a separação entre os picos da densidade de estados $D(E)$ tornam-se mais evidente no caso abrupto do que no caso suave.

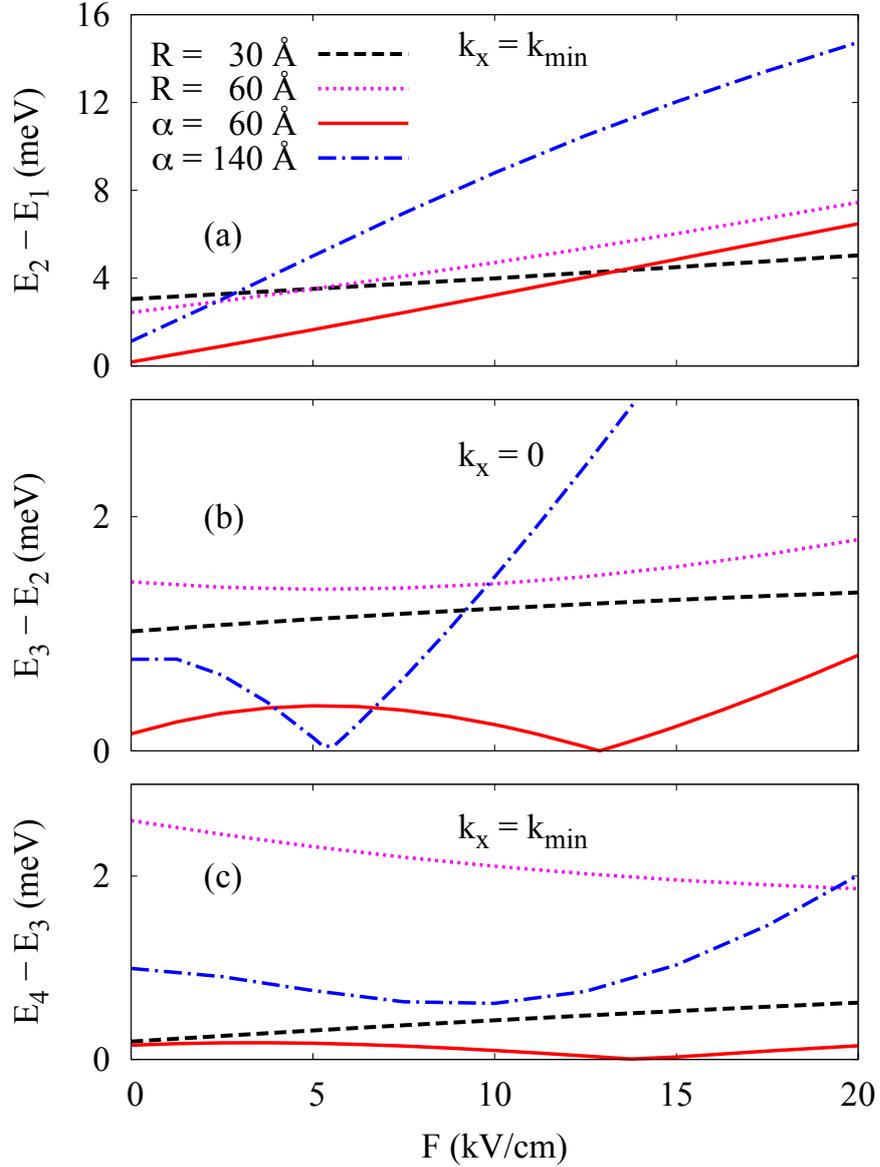


Figura 31: Diferenças entre: (a) o primeiro e o segundo níveis de energia $E_2 - E_1$ em um valor mínimo do vetor de onda $k_x = k_{min}$ na primeira zona de Brillouin, (b) o segundo e o terceiro níveis de energia $E_3 - E_2$ em $k_x = 0$ e (c) o quarto e o quinto níveis $E_4 - E_3$ em $k_x = k_{min}$ como função do campo elétrico F aplicado para diferentes valores de raio R e amplitude α .

As diferenças entre: (a) o primeiro e o segundo níveis de energia quando k_x está no limite da primeira zona de Brillouin ($k_x = k_{min}$), (b) o segundo e o terceiro níveis quando $k_x = 0$ e (c) o terceiro e o quarto níveis em $k_x = k_{min}$ são mostrados na Fig.31 como função do campo elétrico transversal F aplicado para valores de raio $R = 30, 60 \text{ \AA}$ para o caso

abrupto e amplitude $\alpha = 60, 140 \text{ \AA}$ no caso suave. Observamos que é possível ajustar os valores de campo elétrico para obter situações onde $E_3 = E_2$, para $F \sim 5.6 \text{ kV/cm}$ com $\alpha = 140 \text{ \AA}$, e para $F \sim 13 \text{ kV/cm}$ com $\alpha = 60 \text{ \AA}$ [ver Fig.31(b)]. Também é possível obtermos $E_4 = E_3$ para $F \sim 14 \text{ kV/cm}$ com $\alpha = 60$ [ver Fig.31(c)]. O *gap* de energia entre E_1 e E_2 , por outro lado, cresce apenas com o campo elétrico, e a taxa de crescimento é maior para maiores valores de R e α , que é apenas uma consequência do fato de que o estado fundamental E_1 se torna mais confinado, ou seja, com uma banda mais plana, à medida que a intensidade do campo elétrico aumenta. As situações em que $E_2 = E_3$ e $E_4 = E_3$ são de interesse particular: um artigo recente [58] demonstrou que elétrons nestas regiões sem *gaps* do espectro podem ser tratadas efetivamente como férmions de Dirac sem massa, i.e., sua dispersão eletrônica é aproximadamente linear na vizinhança destes pontos da zona de Brillouin. Na verdade, a discussão neste artigo recente tem relação com uma super-rede de poços de potencial quadrado a qual, se ajustada a algumas combinações de largura e profundidade, exhibe estados $E_2 = E_3$ e $E_4 = E_3$ na estrutura de bandas. Entretanto, é difícil de ajustar à vontade estes parâmetros em heteroestruturas semicondutoras, enquanto que no sistema proposto aqui, a saber, uma sequência de curvas em um filme fino semicondutor, podemos facilmente ajustar o confinamento pelo campo elétrico externo para obtermos estas propriedades na estrutura de bandas.

3.4.2 Probabilidade de transmissão e espalhamento em sub-bandas

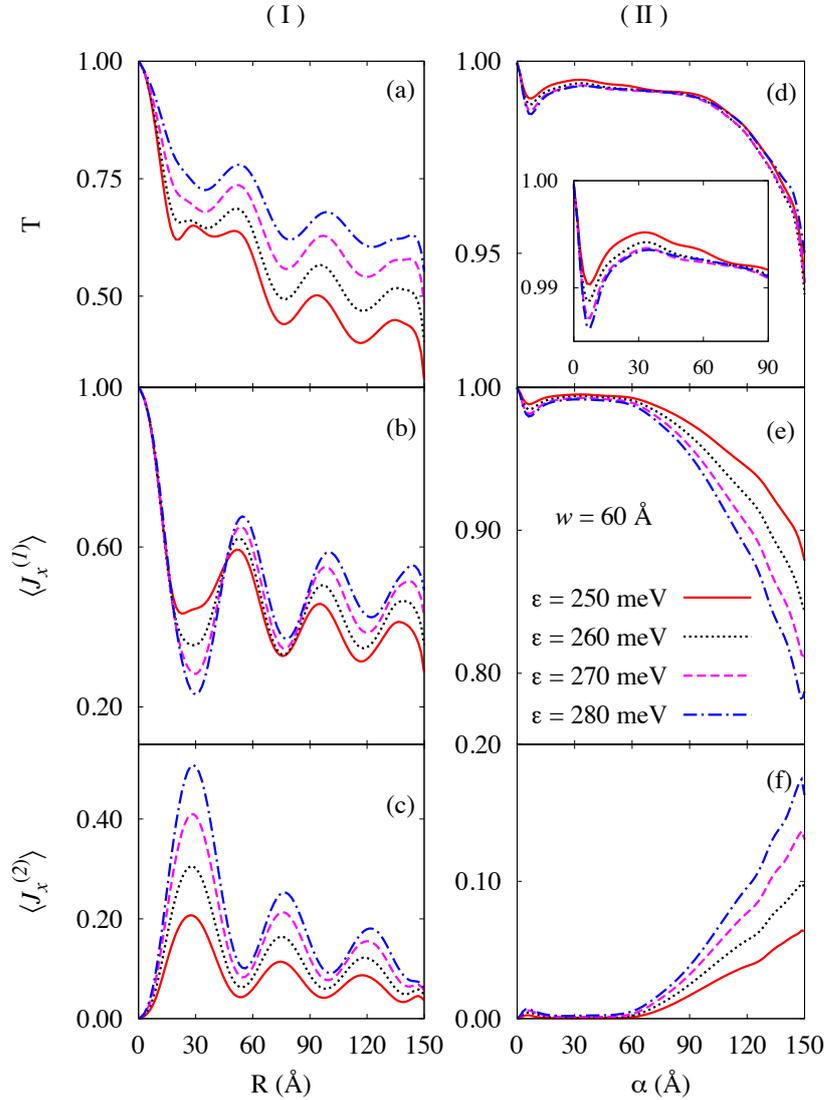


Figura 32: Probabilidades de transmissão como função (a) do raio de um filme circular e (d) da amplitude do filme com curvatura suave, para os casos abrupto (I) e suave (II), respectivamente. As contribuições dos estados na primeira ((b) e (e)) e segunda ((c) e (f)) sub-bandas para a probabilidade de transmissão também são mostradas na figura.

A Fig.32 mostra curvas de probabilidade de transmissão como função do raio R da curva circular, para o caso abrupto, e a amplitude α da curva, no caso suave. A figura também mostra as contribuições de corrente de probabilidade devido à primeira e à segunda sub-bandas. O pacote de onda inicial tem uma energia cinética $\varepsilon_i = 250, 260,$

270 e 280 meV. Vemos que a transmissão T diminui à medida que o raio R ou a amplitude α aumenta. Notamos que essas curvas têm um comportamento periódico para o caso abrupto, de modo que as contribuições para a primeira e a segunda sub-bandas têm valores mínimos e máximos à medida que aumentamos o raio de curvatura. Este comportamento ocorre devido a efeitos de ressonância do pacote de onda com os estados da região curva, e estes valores mínimos e máximos ocorrem para valores de R pouco maiores à medida que a energia do pacote de onda aumenta. Devido a tais efeitos, o raio $R = 30$ Å é o valor que dá uma maior contribuição na segunda sub-banda, o qual é responsável por mais de 50% de contribuição na banda para $\varepsilon_i = 280$ meV. Por outro lado, no caso suave, as oscilações desaparecem, mas ainda é possível controlar a projeção do pacote de onda na segunda sub-banda se apenas variarmos o valor da amplitude. Para $\alpha = 150$ Å, por exemplo, temos uma contribuição de quase 20% na segunda sub-banda para $\varepsilon_i = 280$ meV. A transmissão total (d), nesse caso, praticamente não varia ao variarmos a energia do pacote de $\varepsilon_i = 250$ até 280 meV.

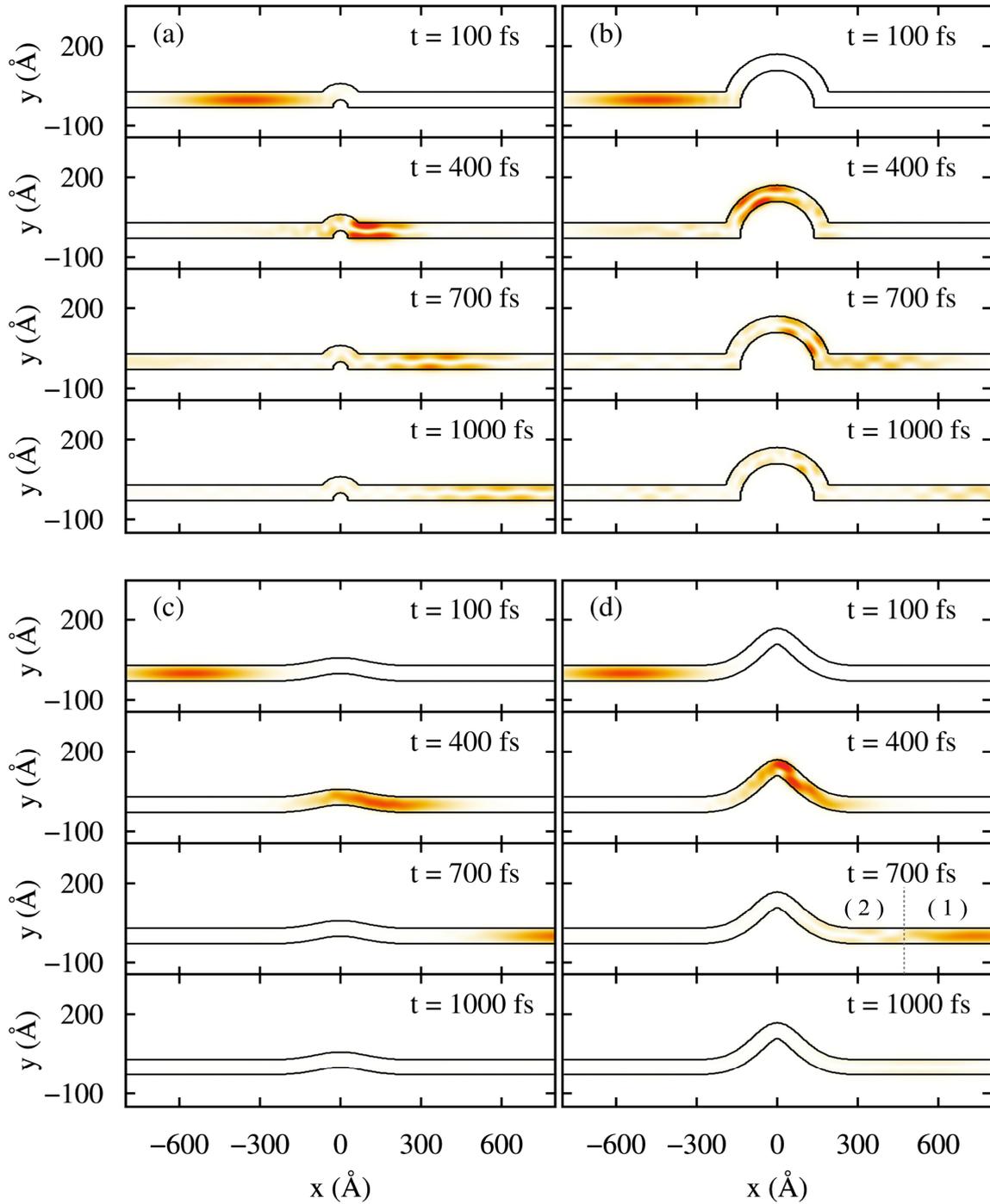


Figura 33: Imagens capturadas do pacote de onda em quatro diferentes instantes de tempo t para $\varepsilon_i = 280$ meV sendo espalhado pelas curvas abruptas (painéis superiores) para $R = 30$ Å (a), 140 Å (b) e suaves (painéis inferiores) para $\alpha = 30$ Å (c), 140 Å (d).

Na Fig.33, essas contribuições podem ser melhor visualizadas através de imagens

capturadas em diferentes instantes de tempo do pacote de onda com energia cinética inicial $\varepsilon_i = 280$ meV, considerando os casos abruptos (acima) e suave (abaixo). Usamos $R = 30, 140$ Å para o caso abrupto e $\alpha = 30, 140$ Å para o caso suave, os quais são valores que têm contribuições de corrente de probabilidade na segunda sub-banda bem definidas pelos gráficos de transmissão da Fig.32. Analisando as curvas do painel superior (do caso abrupto), percebemos que em (a), onde o raio $R = 30$ Å, a intensidade do pacote de onda em $y = 0$ é nula em $t = 700$ fs, resultado que concorda com as curvas da Fig.32(b) e (c), que mostram uma maior contribuição na segunda sub-banda para este valor de raio e energia inicial no caso abrupto. Já para $R = 140$ Å mostrado na Fig.33 (b), em $t = 700$ fs, vemos que a função possui valores finitos em $y = 0$, sugerindo uma maior contribuição na primeira sub-banda de energia, o que confirma os resultados da Fig.32(b) e (c). Nas Figs.33 (c) e (d) do caso suave, percebemos um comportamento contrário ao do caso abrupto. Para $\alpha = 30$ Å, a função praticamente não tem contribuições na segunda sub-banda, ao passo que para $\alpha = 140$ Å, em $t = 700$ fs, é nítida a existência de duas regiões na figura: (1) e (2), onde a função possui intensidade $y \neq 0$ e $y = 0$, respectivamente. Podemos concluir que a função possui contribuições na primeira e na segunda sub-bandas, e que a parte com maior contribuição na primeira sub-banda se desloca com velocidade média maior do que a parte da função com mais contribuição na segunda sub-banda, como já havíamos previsto na Eq.(3.22).

4 *Conclusões e Perspectivas*

Os resultados obtidos no Capítulo 2 sugerem que as propriedades de um gás de elétrons confinado em um setor de uma casca cilíndrica circular e imerso em um campo magnético perpendicular ao eixo, do cilindro são determinadas pelo tamanho da área (confinamento geométrico). Essas propriedades também dependem da intensidade do campo magnético contínuo e de sua inclinação com relação à superfície. Em outras palavras, a intensidade do campo magnético é responsável pelo confinamento magnético, e sua direção impõe a simetria e os efeitos de borda do sistema.

Devemos dizer que a área e a curvatura da região de confinamento, junto com a intensidade e direção do campo magnético, determinam as características físicas desses sistemas. Devemos enfatizar que o arranjo geométrico da região de confinamento é fixo quando o sistema é preparado. Entretanto, suas propriedades podem ser controladas externamente pela intensidade e direção do campo magnético. Essas características fazem desses sistemas bons candidatos para uso em aplicações tecnológicas que precisam de um sistema sensível a pequenas variações da intensidade ou inclinação do campo magnético externo. Por exemplo, é esperado que as propriedades de transporte desses sistemas também sejam sensíveis a essa simetria e portanto, na presença de um campo magnético contínuo, a condutividade possa ser controlada com a rotação do sistema em torno do eixo de simetria.

Quantidades como energia livre de Helmholtz, magnetização e outras que não foram aqui estudadas devem depender desses parâmetros, o que abre um leque de possibilidades futuras de novos trabalhos a serem realizados, incluindo o cálculo da condutividade elétrica.

No Capítulo 3, investigamos como a curvatura de um filme semicondutor afeta suas propriedades eletrônicas e de transporte. Demonstramos que, mesmo para um filme com largura uniforme, o potencial criado exclusivamente pela geometria de curvatura dos filmes modifica drasticamente a estrutura de bandas, criando gaps de energia e bandas quase

planas, devido ao confinamento quântico nas regiões de maiores curvaturas. Mostramos ser possível o confinamento eletrônico apenas com o aumento da curvatura e que, para parâmetros fixos de curvatura, tal confinamento pode ser melhorado através de um campo elétrico externo aplicado. Mostramos que este confinamento pode produzir bandas de Dirac, que são relações de dispersão lineares para alguns valores de campo elétrico e amplitude da estrutura suave. O espalhamento de um pacote de onda eletrônico por estas curvaturas também é investigado, sendo demonstrado que, apesar de as curvaturas não afetarem significativamente a probabilidade de transmissão, a qual é reduzida a, no máximo, $\approx 10\%$ em todos os casos considerados, elas são responsáveis por significantes transições entre bandas, especialmente por valores moderados de raio ou amplitude do canal. Acreditamos que esses resultados são importantes para esclarecer os efeitos de curvatura de trabalhos anteriores considerando elétrons em estruturas curvas, i.e., fios quânticos *v-groove*, também relevantes para melhor entendermos as propriedades físicas de membranas e filmes semicondutores sintetizados recentemente.

Resultados de transmissão com a variação do raio do sistema para diferentes valores de campo elétrico na direção positiva de y e seus respectivos raios de corte, onde não há transmissão do pacote, serão estudados futuramente. Estudaremos também a propagação de elétrons nessas estruturas curvas para valores de campo elétrico F transversal tais que as energias se comportam como bandas de Dirac. Além disso, há um grande interesse em estudar a energia de ligação de excitons nesses sistemas em função da curvatura da estrutura. Também aplicaremos campos magnéticos nesses sistemas para um entendimento mais geral das propriedades eletrônicas e de transporte desses sistemas curvos.

5 *Apêndice A - Artigos Publicados, Submetidos e Aceitos*

O segundo Capítulo desta tese, que trata das *Propriedades Termodinâmicas de um Gás de Elétrons em uma Superfície Curva*, foi publicado em forma de artigo na revista europeia *The European Physical Journal* em 11 de Setembro de 2013, sob o título *Thermodynamic properties of an electron gas on a curved surface*, tendo como autores Francisco Florêncio Batista Júnior, Gil de Aquino Farias e Nilson Sena de Almeida. (Link da revista: <http://epjb.epj.org/articles/epjb/abs/2013/09/b130495/b130495.html>).

O terceiro Capítulo desta tese, intitulado *Propriedades Eletrônicas e de Transporte de Filmes Semicondutores com Deformações de Curvatura* foi submetido à revista *Solid State Communication* e aceito para apresentação na *International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices 2014 (ICSNN)*.

6 Apêndice B - Potencial de Curvatura de uma Partícula Confinada em uma Superfície Curvilínea

Vamos considerar uma partícula de massa m permanentemente ligada a uma superfície S de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$, onde \vec{r} é o vetor posição de um ponto P arbitrário sobre a superfície. A porção do espaço em uma vizinhança imediata de S pode ser parametrizada como (Fig.34)

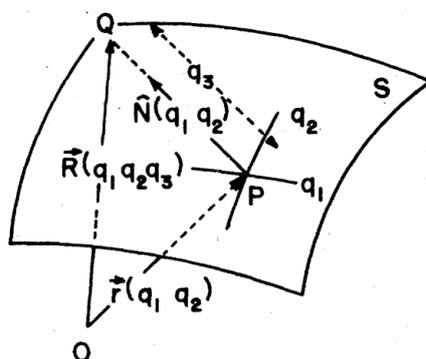


Figura 34: Sistema de coordenadas curvilíneas sobre a superfície de equação paramétrica $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$.

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \hat{N}(q_1, q_2), \quad (6.1)$$

onde $\hat{N}(q_1, q_2)$ é um vetor normal à superfície S com origem em P . O valor absoluto da coordenada q_3 nos dá, para pontos onde a Eq.(6.1) não é singular, a distância entre a superfície S e o ponto Q de coordenadas (q_1, q_2, q_3) . Consideramos um potencial $V = V_\lambda(q_3)$, onde λ é um parâmetro de confinamento, de modo que $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} V_\lambda(q_3)$ é nulo, se $q_3 = 0$ ou infinito se $q_3 \neq 0$.

Antes de resolver a equação de Schrödinger faremos uma breve revisão das propriedades matemáticas do sistema de coordenadas em (6.1). Chamamos $g_{ij} = (\partial \vec{r} / \partial q_i) (\partial \vec{r} / \partial q_j)$, $i, j = 1, 2$, componentes covariantes do tensor métrico da superfície S , $g = \det(g_{ij})$ e $h_{ij} = h_{ji}$, os coeficientes da segunda forma fundamental. Como as derivadas do vetor normal $\hat{N}(q_1, q_2)$ estão sobre o plano tangente à superfície, temos

$$\frac{\partial \hat{N}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 \alpha_{ij} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad (6.2)$$

com

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= (g_{12}h_{21} - g_{22}h_{11})/g \\ \alpha_{12} &= (h_{11}g_{21} - h_{21}g_{11})/g \\ \alpha_{21} &= (h_{22}g_{12} - h_{12}g_{22})/g \\ \alpha_{22} &= (h_{21}g_{12} - h_{22}g_{11})/g, \end{aligned} \quad (6.3)$$

que são as equações de Weingarten. De (6.1) e (6.2), obtemos

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^2 (\delta_{ij} + \alpha_{ij}q_3) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2 \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} = \hat{N}(q_1, q_2). \quad (6.5)$$

Na vizinhança tridimensional de S , as componentes covariantes do tensor métrico são dadas por

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (6.6)$$

Usando as Eqs.(6.4) e (6.5) e denotando a matriz transposta através do sobrescrito T , temos

$$\begin{aligned} G_{ij} &= g_{ij} + [\alpha g + (\alpha g)^T]_{ij} q_3 + (\alpha g \alpha^T)_{ij} q_3^2, \\ G_{i3} &= G_{3i} = 0, \quad i = 1, 2; \quad G_{33} = 1. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Podemos agora voltar nossa atenção à solução da equação de Schrödinger . Escrevendo

o Laplaciano em coordenadas curvilíneas (q_1, q_2, q_3) , obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} (\bar{G}^1)_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) + V_\lambda(q_3) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (6.8)$$

onde $G = \det(G_{ij})$. Devido à estrutura de G_{ij} dada na Eq.(6.7), podemos separar o Laplaciano em duas partes: a parte superficial, denotada por $D(q_1, q_2, q_3)$, dada pelos termos $i, j = 1, 2$, e a parte normal, definida por $i = j = 3$. Podemos então escrever

$$-\frac{\hbar^2}{2m} D(q_1, q_2, q_3) \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} (\ln \sqrt{G}) \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right) + V_\lambda(q_3) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (6.9)$$

Como estamos procurando uma função de onda na superfície, dependendo apenas das variáveis q_1 e q_2 , somos naturalmente levados a introduzir uma nova função de onda χ a partir da qual, no momento da separação $\chi(q_1, q_2, q_3) = \chi_t(q_1, q_2) \chi_n(q_3)$, somos capazes de definir a densidade de probabilidade superficial $|\chi_t(q_1, q_2)|^2 \int |\chi_n(q_3)|^2 dq_3$. A transformação adequada $\psi \rightarrow \chi$ pode ser facilmente deduzida do volume dV expresso em termos das coordenadas curvilíneas q_1, q_2, q_3 . Usando as Eqs.(6.4) e (6.4), temos

$$dV = f(q_1, q_2, q_3) dS dq_3, \quad (6.10)$$

onde $dS = \sqrt{g} dq_1 dq_2$ (o elemento de área da superfície) e

$$f(q_1, q_2, q_3) = 1 + Tr(\alpha_{ij}) q_3 + \det(\alpha_{ij}) q_3^2. \quad (6.11)$$

A expressão da Eq.(6.10) agora nos dá o resultado desejado:

$$\chi(q_1, q_2, q_3) = [f(q_1, q_2, q_3)]^{1/2} \psi(q_1, q_2, q_3). \quad (6.12)$$

Introduzindo essa substituição na Eq.(6.9), obtemos

$$\begin{aligned} \sqrt{f} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} D \left(\frac{\chi}{\sqrt{f}} \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + \frac{1}{4f^2} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial q_3} \right)^2 - 2f \frac{\partial^2 f}{\partial q_3^2} \right] \chi \right\} \\ + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Podemos agora levar em conta os efeitos do potencial $V_\lambda(q_3)$. Como no limite de $\lambda \rightarrow \infty$ existem duas barreiras de potencial em ambos os lados da superfície, seu valor será significativamente diferente de zero apenas em uma pequena faixa de valores de q_3 em torno de $q_3 = 0$. Neste caso, podemos fazer $q_3 \rightarrow 0$ em todos os coeficientes da Eq.(6.13)

[exceto no termo contendo $V_\lambda(q_3)$]. O resultado da combinação das Eqs. (6.7) e (6.11) é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} ([\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij})) \chi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi = i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (6.14)$$

A Eq.(6.14) pode agora ser facilmente separada se fizermos $\chi = \chi_t(q_1, q_2, t) \times \chi_n(q_3, t)$, onde os subscritos t e n são relativos às funções tangente e normal, respectivamente. O procedimento usual nos leva às equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_n}{\partial q_3^2} + V_\lambda(q_3) \chi_n = i\hbar \frac{\partial \chi_n}{\partial t}, \quad (6.15)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{g} (\bar{g}^1)_{ij} \frac{\partial \chi_t}{\partial q_j} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} ([\frac{1}{2} Tr(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij})) \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t}. \quad (6.16)$$

A relação (6.15) é apenas a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula confinada em um potencial transversal $V_\lambda(q_3)$, e pode ser ignorada em todos os cálculos futuros. A expressão (6.16), entretanto, é mais interessantes devido à presença do potencial da superfície $V_S(q_1, q_2) = -(\hbar^2/2m) \{ \frac{1}{2} [Tr(\alpha_{ij})]^2 - \det(\alpha_{ij}) \}$.

Usando a Eq.(6.3) esse termo pode ser escrito de uma forma mais usual,

$$V_S(q_1, q_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{8m} (k_1 - k_2)^2, \quad (6.17)$$

onde k_1 e k_2 são as curvaturas principais da superfície S , e

$$M = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \frac{1}{2g} (g_{11}h_{22} + g_{22}h_{11} - 2g_{12}h_{12}), \quad (6.18)$$

que é a curvatura média, e

$$K = k_1 k_2 = \frac{1}{g} \det(h_{ij}), \quad (6.19)$$

que é a curvatura Gaussiana.

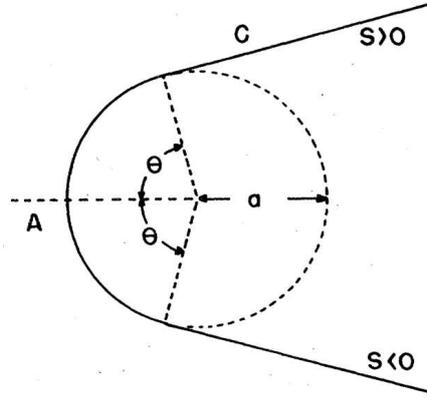


Figura 35: Seção reta C de uma superfície encurvada em torno de um cilindro de raio a . O ponto médio A foi escolhido como a origem do arco s .

Como um exemplo de aplicação prática desse resultado, consideramos uma superfície encurvada sobre um cilindro de raio a , como mostra a Fig.35. Seleccionando os parâmetros do arco s da seção reta de C e a coordenada cartesiana z perpendicular ao plano da figura, obtemos, das Eqs.(6.16)-(6.19)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \chi_t}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 \chi_t}{\partial z^2} \right) - \frac{\hbar^2}{8m} \kappa(s)^2 \chi_t = i\hbar \frac{\partial \chi_t}{\partial t}, \quad (6.20)$$

onde $\kappa(s)$ é a curvatura de C no ponto do arco de s . Se considerarmos a solução de $\chi_t(s, t)$ independente de z , obtemos a equação de Schrödinger unidimensional na presença de um poço de potencial quadrado $V(s) = V_0$, se $|s| < a\theta$ ou $V(s) = 0$, se $|s| > a\theta$, onde $V_0 = -\hbar^2 \kappa^2 / 8m$. Para uma curva qualquer escrita na forma $y = f(x)$, a equação da curvatura será

$$\kappa = \frac{\frac{d^2 y}{dx^2}}{\left[1 + \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \right]^{3/2}}, \quad (6.21)$$

que no caso cilíndrico dá $\kappa = 1/a$ e $V_0 = -\hbar^2 / 8ma^2$.

Referências

- [1] L. V. Radushkevich e V. M. Lukyanovich, Zh. Fiz. Khim. **26**, 88 (1952).
- [2] A. Oberlin, M. Endo, e T. Koyama, J. Cryst. Growth **32**, 335 (1976).
- [3] S. Iijima, Nature (London) **354**, 56 (1991).
- [4] M. S. Dresselhaus, P. Avouris, M. Endo, H. Dai, J.-C. Charlier, S. Iijima, R. Tenne, A. K. Zettl, S. G. Louie, Z. Yao, C. Dekker, T. Wang Odom, J. H. Hafner, C. M. Lieber, R. Saito, H. Kataura, J. H. Fink, P. Lambin, J. Hone, B. I. Yakobson, L. Forró, C. Schönenberger, P. M. Ajayan, e O. Z. Zhon, in *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications*, edição por M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, e P. Avouris (Springer- Verlag, Berlin, 2000).
- [5] Haotian Wang, Desheng Kong, Petr Johanes, Judy J. Cha, Guangyuan Zheng, Kai Yan, Nian Liu, e Yi Cui, MoSe₂ and WSe₂ Nanofilms with Vertically Aligned Molecular Layers on Curved and Rough Surfaces. *Nan. Lett.* **13(7)**, 3426 (2013).
- [6] R. Alston, S. Iyer, T. Bradley, J. Lewis, G. Cunningham and E. Forsythe, Investigation of the effects of deposition parameters on indium-free transparent amorphous oxide semiconductor thin-film transistors fabricated at low temperatures for flexible electronic applications. *SPIE*, **9005** (2014).
- [7] Y. H. Kim, J. S. Heo, T. H. Kim, S Park, M. H. Yoon, J. Kim, M. S. Oh, G. R. Yi, Y. Y. Noh and S. K. Park, *Nature* **480**,128-133 (2012).
- [8] K. Nomura, H. Ohta, A. Takagi, T. Kamiya, M. Hirano and H. Hosono, Room-temperature fabrication of transparent flexible thin-film transistors using amorphous oxide semiconductors. *Nature* **432**, 488-492 (2004).
- [9] A.B. Fowler, F.F. Fang, W.E. Howard, P.J. Stiles, Phys. Rev. Lett. **16** (1966) 901.
- [10] F. Stern, Phys. Rev. Lett. **18** (1967) 546.
- [11] J.P. Kotthaus, G. Abstreiter, G.F. Koch, Phys. Rev. Lett. **34** (1975) 151.
- [12] R.B. Laughlin, Phys. Rev. B **23** (1981) 5632.
- [13] M.L. Leadbeater et al., Phys. Rev. B **52** (1995) R8629.
- [14] M. Grayson et al., Physica E (submitted for publication) cond-mat/0308557.
- [15] A. Vorob'ev, V. Prinz, V. Preobrazhenskii, B. Semyagin, Jpn. J. Appl. Phys. **42** (2003) L7.
- [16] A. Lorke, S. Böhm, e W. Wegscheider, Superlattices Microstruct. **33**, 347 (2003).

-
- [17] S. Böhm, Dissertation, LMU München, 2002.
- [18] N. Shaji, H. Qin, R. H. Blick, L. J. Klein, C. Deneke, e O. G. Schmidt, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 042101 (2007).
- [19] S. V. Golod, V. Ya. Prinz, P. Wägli, L. Zhang, O. Kirfel, E. Deckhardt, F. Glaus, C. David, e D. Grützmacher, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3391 (2004).
- [20] O. G. Schmidt e K. Eberl, *Nature (London)* **410**, 168 (2001).
- [21] Prinz, V. Y. et al. *Physica E* **6**, 828-831 (2000).
- [22] Saptarshi Das e Joerg Appenzeller, *Phys. Status Solidi RRL* **7**, 4, 268-273 (2013).
- [23] E. Levy, I. Sternfeld, M. Eshkol, M. Karpovski, B. Dwir, A. Rudra, E. Kapon, Y. Oreg, e A. Palevski, Experimental evidence for Luttinger liquid behavior in sufficiently long GaAs V-groove quantum wires. *Phys. Rev. B* **85**, 045315 (2012).
- [24] *Phys. Rev. B*, **59**, 16 (1999).
- [25] Moll, John L. *Physics of Semiconductors* (McGraw-Hill, New York, USA, 1964).
- [26] E. Spence, "Electronic Semiconductors", McGraw-Hill, New-York, USA, 1958).
- [27] A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, e B. Szafran, *Phys. Rev. B* **2280**, 125331 (2009).
- [28] R. Kalina, B. Szafran, S. Bednarek, e F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 066807 (2009).
- [29] H. Aoki e H. Suezawa, *Phys. Rev. A* **46**, R1163 (1992).
- [30] G. Y. Chen, B. Jensen, V. Stolojan e S. R. P. Silva, *Carbon* **49**, 280-285 (2011).
- [31] M. T. Björk, B. J. Ohlsson, T. Sass, A. I. Persson, C. Thelander, M. H. Magnusson, K. Deppert, L. R. Wallenberg e L. Samuelson, *Nano Lett.* **2**, 87 (2002).
- [32] K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, A. Riedel, e K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **75**, 045347 (2007).
- [33] G. Cuoghi, G. Ferrari, e A. Bertoni, *Phys. Rev. B* **79**, 073410 (2009).
- [34] K.-J. Friedland, A. Siddiki, R. Hey, H. Kostial, A. Riedel, e D. K. Maude, *Phys. Rev. B* **79**, 125320 (2009).
- [35] A. Marchi, S. Reggiani, M. Rudan, e A. Bertoni, *Phys. Rev. B* **72**, 035403 (2005).
- [36] M. Trushin e J. Schliemann, *New J. of Phys.* **9**, 346 (2007).
- [37] G. Ferrari, A. Bertoni, G. Goldoni, e E. Molinari, *Phys. E*, **40**, 2040-2042 (2008).
- [38] G. Ferrari, A. Bertoni, G. Goldoni, e E. Molinari, *Phys. Rev. B*, **78** 115326 (2008).
- [39] A. V. Chaplik, L. I. Magarill e D. A. Romanov, *Physica B* **249-251**, 377-382 (1998).

-
- [40] R. C. T. da Costa, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981).
- [41] G. Ferrari e G. Cuoghi, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 230403 (2008).
- [42] I. S. Gradshteyn, *Table of Integrals, Series e Products, Seventh Edition* (Elsevier, Academic Press, California, USA,2007).
- [43] V. Mitin, V. Kochelap, e M. Stroschio, *Quantum Heterostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, England,1999).
- [44] H. Aoki, T. Ando, *Solid State Commun.* **38**, 1079
- [45] R.E. Prange, *Phys. Rev. B* **23**, 4802 (1981).
- [46] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, USA,1987).
- [47] M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 319 (1990).
- [48] N. Watanabe e M. Tsukada, *Phys. Rev. E* **62**, 2914 (2000).
- [49] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Second Edition, (1992).
- [50] D. E. Manolopoulos, *J. Chem. Phys.* **117**, 9552 (2002).
- [51] R. C. T. da Costa, Constraints in quantum mechanics. *Phys. Rev. A* **25**, 2893 (1982).
- [52] L. Lapidus and G. F. Pinder, *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*. John Wiley & Sons, New York (1999).
- [53] S. K. Lele, Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution. *J. Comput. Phys.* **103**, 16-42 (1992).
- [54] A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters and B. Szafran, Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width. *Phys. Rev. B* **80**, 125331 (2009).
- [55] M. H. Degani and M. Z. Maialle, Numerical Calculations of the Quantum States in Semiconductor Nanostructures. *J. Comput. Theor. Nanosci.* **7**, 454 (2010).
- [56] J. P. M. Braga (2011), *Técnica Split Operator em Coordenadas Generalizadas*. Dissertation, Physics Department, Federal University of Ceará, Fortaleza.
- [57] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Plenum Press, New York, 1994). potential. *J. Chem. Phys.* **117**, 21 (2002).
- [58] F. Carosella, A. Wacker, R. Ferreira and G. Bastard, One-dimensional massless Dirac bands in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B* **89**, 235301 (2014).

Thermodynamic properties of an electron gas on a curved surface

F.F. Batista Jr.¹, G.A. Farias¹, and N.S. Almeida^{2,a}

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

² Departamento de Física, Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, 59610-210 Mossoró, Rio Grande do Norte, Brazil

Received 15 May 2013

Published online 11 September 2013 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2013

Abstract. We report a study on thermodynamic properties of a two-dimensional electron gas confined in a sector of a circular cylinder immersed in a dc magnetic field perpendicular to its axis. This field configuration produces on the electrons in the curved surface, effects similar to a non-homogeneous magnetic field on a flat system. We study these effects by calculating the energy spectra for different curvature radius and symmetries of the magnetic field with respect to the surface. The analysis of the density of states, chemical potential and specific heat of these systems helps to understand the correlation between the externally controlled symmetry and their physical properties.

1 Introduction

Physical properties of an electron gas on curved surfaces have been studied since the second half of the last century [1]. The availability of good quality samples of low dimensional systems with non-planar structures has allowed detailed experimental studies on their physical properties and reignited the motivation to the search for the best understanding of the effects of non-planar confinement on their physical characteristics. Quantum wires and carbon nanotubes [2,3] are examples of well studied curved systems. In the last decade, samples with carriers confined in curved surfaces have been prepared and several works dealing with the physical properties of these quantum systems have been done [4,5]. Among others, we remark the paper of Friedland et al. [6], that deals with quantum Hall effect in a two-dimensional electron gas confined at the surface of a cylinder; Marchi et al. [7], that reports a work on the coherent electron transport in bent cylindrical surfaces; and the Trushin and Schliemann paper [8], that shows some physical properties of two-dimensional electron gas (2DEG) confined in a rolled-up layer. It should also be mentioned the works of Ferrari et al. [9,10], that study the influence of a transverse magnetic field on the physical characteristics of a cylindrical two-dimensional electron gas (C2DEG).

Systems with these characteristics were also grown and studied by Lorke et al. [11]. They used the technique of epitaxial lift-off for preparing them and they analyzed the physical properties of the electron gas confined at cylindrical surfaces with radius $R \simeq 1$ mm; Shaji et al. [12],

by using different technique, prepared and studied similar systems with radius between few nanometers and one micrometer. It should be remarked that, in the presence of dc magnetic field perpendicular to the cylinder axis, these systems have the *effective* magnetic field acting on the C2DEG dependent on the position at the surface (its components parallel and perpendicular to the surface depend on the location of the point investigated).

Carriers confined in a small area of a curved surface have their physical characteristics controlled by the size of the surface, but the curvature also plays an important role in controlling these properties. Furthermore, a magnetic field perpendicular to the cylinder axis produces effects similar to the presence of a non-homogeneous field on a flat system. Together, these effects will control some physical behavior and they can be used to give to this kind of system some specific characteristics. This is the case of the system studied in this work, which consists of a C2DEG similar to that one studied by Chaplik et al. [13]. It can be described as a 2D electron gas confined in a sector of a circular cylinder with radius R under the action of a uniform magnetic field perpendicular to the cylinder axis. As mentioned above, together, the curvature radius, the area of the surface and the inclination of the field with respect to the vector normal to the surface at its border control the inhomogeneity of the effective magnetic field acting on the system and, consequently, its properties. Our primary goal is to relate the direction of the magnetic field (with respect to the normal at a specified point) and the physical characteristics of the system.

The first step is to calculate the energy spectrum for different values of the curvature radius, magnetic field and

^a e-mail: nalmeida@fisica.ufc.br

area of the sector. Once the energy spectrum is known, we compute the density of states, the chemical potential and the specific heat to obtain the dependence of these physical quantities on the geometry of the system, i.e., the dependence on the distribution of the inhomogeneity of the magnetic field at the surface studied. We will show that all physical characteristics of these systems can be controlled by the magnetic field distribution, or equivalently, they are dependent on the curvature radius, but also depend on the direction of the magnetic field with respect to the reference direction.

This paper is organized as follows: in Section 2, we show the formalism necessary to describe the system, including the geometry, the appropriated coordinate system and the analytical definition of the surface S where the gas is confined. The C2DEG is described as an independent particles system and we use one particle approximation/effective mass approximation to find the differential equation for the functions associated to the 2D states. We conclude this section with the description of the procedure used to obtain the energy spectrum and its dependence on the direction of the magnetic field. In Section 3, we use the results obtained for the energy spectrum to calculate the density of states, the chemical potential, and the specific heat as a function of the position of the magnetic field. In Section 4, we present our final comments.

2 The energy spectrum

We define the coordinates q_1 , q_2 and q_3 , as shown in Figure 1, to find after a bit of algebra that in the presence of a dc magnetic field ($\vec{B} = (0, 0, B_3)$) described by the vector potential $\vec{A} = (0, B_3 x, 0)$, the wave functions are obtained from

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + \frac{i\hbar e}{2m}\left[2B_3R\xi\sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right)\frac{\partial\Psi}{\partial q_2}\right] + \frac{e^2}{2m}B_3^2R^2\xi^2\sin^2\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right)\Psi + V_\lambda(\xi)\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

where q_B/R is the angle between the magnetic field and the reference direction, $\xi = (R + q_3)/R$, e is the electron charge ($e > 0$) and V_λ is the confining potential. In the limit used here V_λ is zero when $\xi = 1$ and infinity when $\xi \neq 1$.

We write $\Psi = e^{ik_2q_2}\varphi(q_1)\sigma(\xi)/\sqrt{\xi}$ and we assume the particle is entirely confined at the surface S ($\xi \rightarrow 1$), to find that $\varphi(q_1)$ and $\sigma(\xi)$ are solutions of [15]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dq_1^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\left[R\sin\left(\frac{q_1 - q_B}{R}\right) - q_0\right]^2\varphi = E\varphi, \quad (2)$$

and

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2\sigma}{d\xi^2} + V_\lambda(\xi)\sigma = \epsilon\sigma, \quad (3)$$

where $q_0 = \hbar k_2/eB_3$, k_2 is the wave vector in q_2 direction, $\omega = eB_3/m$ and E the energy (see Ref. [14] for details). We use the prescription of Lorke et al. [11] to write

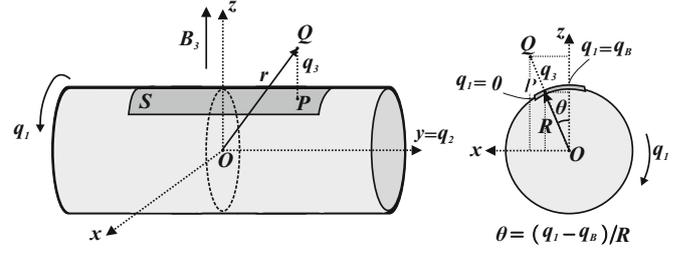


Fig. 1. Geometrical representation of the cylindrical band S and the parameters used to describe it.

$q_1 = q_m + q'_1$, where $q_m = R \arcsin(q_0/R) + q_B$ is the point where the effective potential has the minimum value and q'_1 is the position measured from q_m . If the width of the band is small compared with R ($q'_1 \ll R$), equation (2) can be rewritten as:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dq_1^2} + \frac{1}{2}m\left(\omega \cos \frac{q_m - q_B}{R}\right)^2 (q_1 - q_m)^2 \varphi = E\varphi. \quad (4)$$

We define

$$Z(q_1) = \{(2eB_3/\hbar) \cos[(q_m - q_B)/R]\}^{1/2}(q_1 - q_m)$$

to rewrite equation (4) as:

$$\frac{d^2\varphi}{dZ^2} - \left(\frac{Z^2}{4} + a\right)\varphi = 0, \quad (5)$$

where $a = -E/\{\hbar\omega \cos[(q_m - q_B)/R]\}$. The solutions for equation (4) are written in terms of the parabolic cylinder functions $D_\nu(Z)$ [16] and are given by:

$$U(a, Z) = D_{-a-\frac{1}{2}}(Z) \\ V(a, Z) = \frac{1}{\pi}\Gamma\left(a + \frac{1}{2}\right) \\ \times \left[D_{-a-\frac{1}{2}}(-Z) + \sin(\pi a)D_{-a-\frac{1}{2}}(Z)\right], \quad (6)$$

where $\Gamma(z)$ is the *Gamma Function*. Thus, the dependence of the wave function on q_1 is written as $\varphi(a, Z) = AU(a, Z) + BV(a, Z)$, and the boundary conditions at the left $Z_1 = Z(0)$ and right $Z_2 = Z(L_x)$ edges of the band allow us to write

$$U(a, Z_1)V(a, Z_2) - V(a, Z_1)U(a, Z_2) = 0. \quad (7)$$

We search solutions for a in equation (7) and the set of values a_n satisfying this equation gives the energy levels $E_n(k_2)$.

3 Density of states, chemical potential and specific heat

Once the geometric configuration of the system is fixed, the energy spectrum is obtained from equation (7) and the density of states (DOS) can be determined by [17]:

$$D(E) = \frac{1}{\gamma(2\pi)^{3/2}l_B^2} \sum_n \int_{\eta_i}^{\eta_f} e^{-\frac{[E - E_n(\eta)]^2}{2\gamma^2}} d\eta, \quad (8)$$

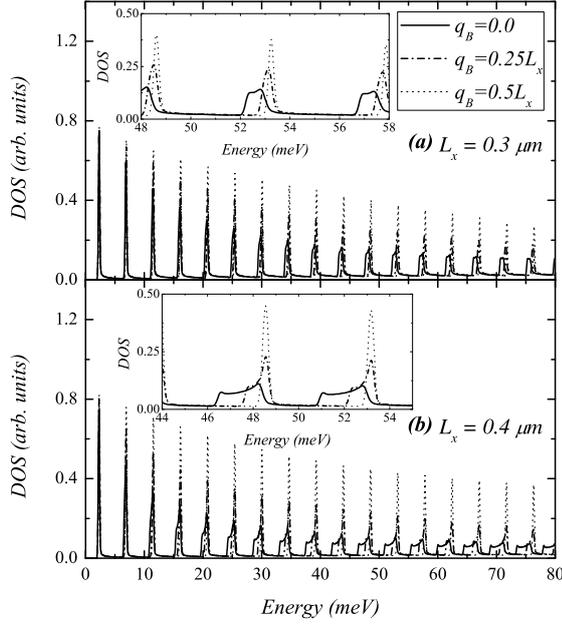


Fig. 2. Density of states for curved bands in presence of $B_3 = 2$ T with $R = 1.0 \mu\text{m}$ and widths $L_x/R = 0.3$ and 0.4 . Results are shown for $q_B/L_x = 0.0, 0.25$ and 0.5 . The states arising between the symmetric peaks are a consequence of the asymmetry introduced by the magnetic field.

where instead of delta functions we use Gaussian functions with width γ $[\delta(E - E_n(k_2)) \rightarrow e^{-(E - E_n(k_2))^2 / 2\gamma^2} / \gamma\sqrt{2\pi}]$ [18,19] and the sum over k_2 was replaced by the appropriated integral, $\sum_{k_2}(\dots) \rightarrow [L_x L_y / 2\pi l_B^2] \int_{\eta_i}^{\eta_f}(\dots) d\eta$. Moreover, l_B is the magnetic length, L_y the length of the region along q_2 , $\eta = q_0/L_x$ ($q_0 = \hbar k_2 / eB_3$), $\eta_i = (R/L_x) \sin(-q_B/R)$ and $\eta_f = (R/L_x) \sin[(L_x - q_B)/R]$.

It should be remarked that, besides the constraints imposed by the finite surface, the electrons are also magnetically confined. For magnetic fields of moderate intensity the confinement should be strongly dependent on its inclination with respect to the reference direction. It should be remarked that the system will be totally symmetric only when $q_B = 0.5L_x$. Figure 2 shows the density of states (DOS) for $L_x = 0.3 \mu\text{m}$ and $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ calculated for $B_3 = 2$ T. These results were obtained with $\gamma = 0.1$ meV and we will use this value for all numerical calculation presented in this paper. It is observed that in the symmetric configuration ($q_B = 0.5L_x$), the peaks of DOS are almost equally spaced suggesting that, for this field intensity, the borders do not contribute for the confinement of the particles. However, when $q_B \neq 0.5L_x$, the symmetry is lost and in the more asymmetric configuration ($q_B = 0$ or L_x) there are peaks at the same position of the symmetric configuration, but the DOS shows significative values between them. This fact indicates that the externally controlled symmetry/asymmetry is responsible for changes in the distribution of the accessible energy states and, as a consequence, capable to externally control its physical characteristics. We illustrate this point

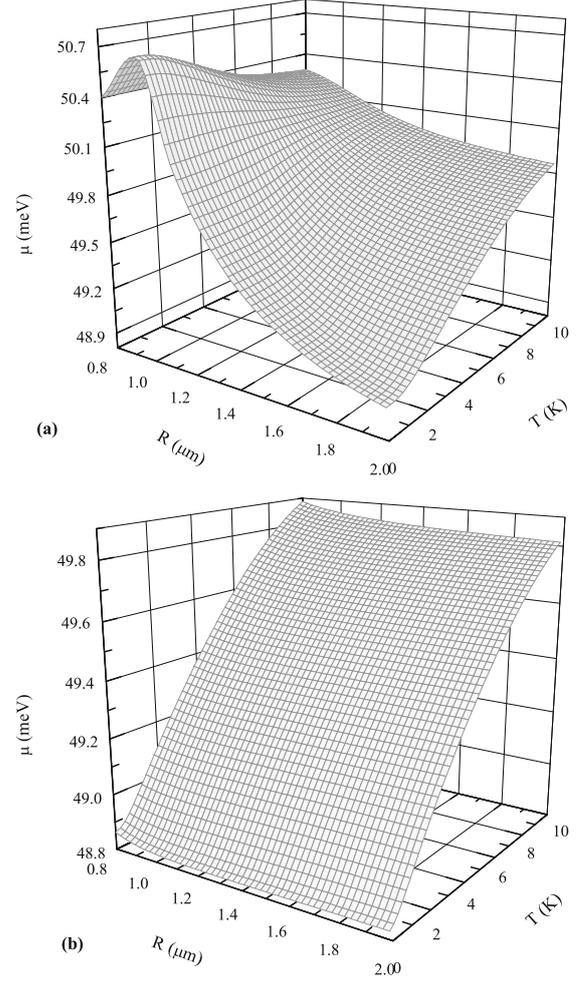


Fig. 3. Temperature dependence of the chemical potential of an electron gas confined in curved bands with different curvature radius R , but with the same width $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ and in presence of magnetic field $B_3 = 2$ T. The label (a) denotes the asymmetric and (b) the symmetric direction of the magnetic field with respect to the surface.

by computing the chemical potential and the specific heat for systems with the same geometric configurations used to calculate the DOS.

The chemical potential is obtained from the calculation of the value of μ that satisfies the equation

$$n_S - \int_0^\infty D(E)F(E, \mu, T)dE = 0, \quad (9)$$

where $F(E, \mu, T) = 1/\{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]\}$ is the Fermi function, k_B is the Boltzmann's constant and T is the temperature. We assume that the electron density is $n_S = 4.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, to obtain numerical values for $\mu(T)$.

Figure 3 shows the behavior of the chemical potential with the radius R and temperature T for $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ and $B_3 = 2$ T in the cases where the magnetic field \vec{B} is in an asymmetric ($q_B = 0$, Fig. 3a) and symmetric position ($q_B = 0.5L_x$, Fig. 3b) with respect to the surface.

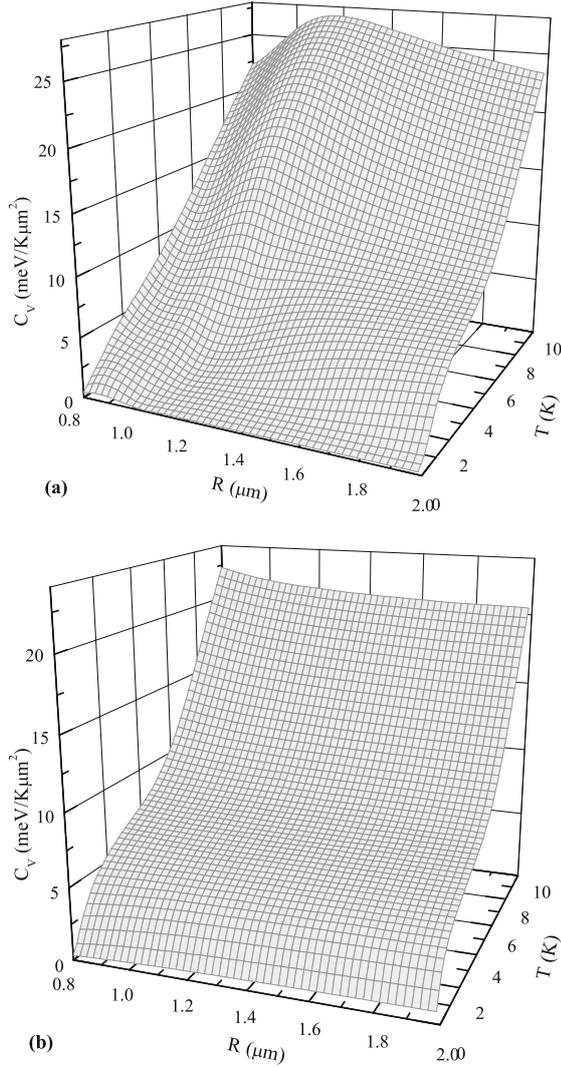


Fig. 4. Temperature dependence of the specific heat of an electron gas confined in curved bands with different curvature radius, but with the same width $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ and in presence of magnetic field $B_3 = 2 \text{ T}$. The label (a) denotes the asymmetric and (b) the symmetric direction of the magnetic field with respect to the surface.

These results show that the dependence of the *DOS* on the field direction (the main responsible by the appearance of energy states just below the regular Landau levels, for example) give a non regular behavior to the chemical potential, including a temperature dependence controlled by the radius R . It should be observed that in the symmetric configuration the chemical potential is almost insensitive to the curvature radius. It should be remarked that, at low temperatures, the behavior of the chemical potential will depend on the number of accessible states with energies just above the Fermi energy. This fact justifies (explains) the dependence of the chemical potential with R in the asymmetric configuration, since the energy spectrum is strongly R dependent.

With these results on hand we calculate the internal energy [20], $U = \int_0^\infty ED(E)F(E, \mu, T)dE$, from which we can obtain the specific heat

$$C_V(T) = [4k_B]^{-1} \int_0^\infty ED(E)f'(E, \mu, T)dE,$$

with $f'(E, \mu, T)$ given by:

$$f'(E, \mu, T) = \left(\frac{E - \mu}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{d\mu}{dT} \right) \text{sech}^2 \left(\frac{E - \mu}{2k_B T} \right). \quad (10)$$

This function has a single peak centered at $E = \mu$. As a consequence, only the states with energy close to this value will effectively contribute to C_V . This fact gives to C_V almost the same sensitivity to the curvature radius as the chemical potential. Therefore, similarly to the discussion on the dependence of the chemical potential on the magnetic field direction, the specific heat is also dependent on the externally controlled symmetry of the system. Figure 4 shows the behavior of the specific heat with R and T for $L_x = 0.4 \mu\text{m}$ and $B_3 = 2 \text{ T}$ for asymmetric (a) and symmetric (b) configuration of the magnetic field \vec{B} . As can be seen in this figure, the sensibility of the system to the curvature and the externally controlled symmetry is clearly observed.

4 Conclusions

The results reported in this paper suggest that the properties of an electron gas confined in a portion of a cylindrical surface and immersed in a magnetic field perpendicular to the cylinder axis are determined by the size of the area (geometrical confinement). They also depend on the intensity of the dc magnetic field, but the symmetry, as well as almost all physical properties, depend on qB/R (inclination of the magnetic field with respect to the reference direction). In other words, the strength of the field is responsible by the magnetic confinement and its direction imposes the symmetry and edge effects on the system. In summary, we should say that the area and curvature of the confinement region, together with the strength and direction of the magnetic field, determine the physical characteristics of these systems. It must be emphasized that the geometrical arrangement of the confinement region are fixed when the system is prepared (i.e. they are unchanged). However, their properties can be externally controlled by the intensity and direction of the magnetic field. This characteristic makes these systems good candidates to be used for technological application that needs systems sensitive to small changes in the intensity and/or direction of magnetic fields. For example, it is expected that the transport properties of these systems are also sensitive to the symmetry and then, in presence of a fixed dc magnetic field, the conductivity can be controlled just by small turning of the system around its symmetry axis.

This work has received financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq) under Contract

No. 573925/2008-9. F.F. Batista Jr. would like to thank professor F.M. Peeters, from the University of Antwerp (Belgium), and F.F. Munarin for the enlightening conversations.

References

1. H. Aoki, H. Suezawa, Phys. Rev. A **46**, R1163 (1992)
2. G.Y. Chen, B. Jensen, V. Stolojan, S.R.P. Silva, Carbon **49**, 280 (2011)
3. M.T. Björk, B.J. Ohlsson, T. Sass, A.I. Persson, C. Thelander, M.H. Magnusson, K. Deppert, L.R. Wallenberg, L. Samuelson, Nano Lett. **2**, 87 (2002)
4. K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, A. Riedel, K.H. Ploog, Phys. Rev. B **75**, 045347 (2007)
5. G. Cuoghi, G. Ferrari, A. Bertoni, Phys. Rev. B **79**, 073410 (2009)
6. K.-J. Friedland, A. Siddiki, R. Hey, H. Kostial, A. Riedel, D.K. Maude, Phys. Rev. B **79**, 125320 (2009)
7. A. Marchi, S. Reggiani, M. Rudan, A. Bertoni, Phys. Rev. B **72**, 035403 (2005)
8. M. Trushin, J. Schliemann, New J. Phys. **9**, 346 (2007)
9. G. Ferrari, A. Bertoni, G. Goldoni, E. Molinari, Physica E **40**, 2040 (2008)
10. G. Ferrari, A. Bertoni, G. Goldoni, E. Molinari, Phys. Rev. B **78**, 115326 (2008)
11. A. Lorke, S. Böhm, W. Wegscheider, Superlattices Microstruct. **33**, 347 (2003)
12. N. Shaji, H. Qin, R.H. Blick, L.J. Klein, C. Deneke, O.G. Schmidt, Appl. Phys. Lett. **90**, 042101 (2007)
13. A.V. Chaplik, L.I. Magarill, D.A. Romanov, Physica B **249-251**, 377 (1998)
14. R.C.T. da Costa, Phys. Rev. A **23**, 1982 (1981)
15. G. Ferrari, G. Cuoghi, Phys. Rev. Lett. **100**, 230403 (2008)
16. I.S. Gradshteyn, *Table of Integrals, Series and Products*, 7th edn. (Elsevier, Academic Press, California, 2007)
17. V. Mitin, V. Kochelap, M. Stroschio, *Quantum Heterostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999)
18. H. Aoki, T. Ando, Solid State Commun. **38**, 1079 (1981)
19. R.E. Prange, Phys. Rev. B **23**, 4802 (1981)
20. K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, New York, 1987)

Curvature effects on the electronic and transport properties of semiconductor films

F. F. Batista,¹ Andrey Chaves,^{1,*} and G. A. Farias¹

¹*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,
Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil*

(Dated: August 22, 2014)

We investigate how the curvature of a semiconductor film affects its electronic and transport properties. We study how the geometry-induced potential resulting exclusively from periodic ripples in the film modifies its band structure by inducing electronic confinement. For fixed curvature parameters, such a confinement can be easily tuned by an external electric field, so that features of the band structure such as the energy gaps and band curvature can be controlled by an external parameter. We also show that, for some values of curvature and electric field, it is possible to obtain massless Dirac bands for a smooth structure. Moreover, we use a wave packet propagation method to demonstrate that the ripples are responsible for a significant inter-sub-band transition, specially for moderate values of the ripple height.

PACS numbers: 73.21.Hb, 73.63.Nm, 73.43.Cd

I. INTRODUCTION

Recent experiments have demonstrated the possibility of obtaining thin flexible semiconducting films, such as the work of R. Alston *et al*, which investigates some effects of transparent amorphous oxide semiconductor thin-film transistors for flexible electronic applications¹, the work of Y. H. Kim *et al*, which reports a general method for forming high-performance and operationally stable flexible metal-oxide semiconductors at room temperature², and the work of K. Nomura *et al*, which consists of a method to fabricate transparent flexible thin-film transistors³.

This renewed the interest in investigating quantum confinement and electronic properties in curved planes. In fact, curvature effects have been already partially discussed in the context of v-groove quantum wires,¹⁰ for example. Such a system consist of a bent semiconductor heterostructure - in this case, electrons are mostly confined in the higher curvature region, rather than in the whole inner semiconductor plane, as expected for a conventional heterostructure. However, curvature is not the only effect involved in the electron confinement in v-groove wires: the high curvature region in these systems also exhibit larger width, which, alone, would also induce electronic confinement. Notice that if there is a region of larger width, the ground state energy level is lower in this region and the electron becomes confined there, as a pure quantum effect. The curved membranes considered here, on the other hand, have no reason to exhibit non-uniform width in the curved region *a priori*, therefore, it becomes interesting to investigate separately the effect of the curvature alone on the behavior of electrons confined in a curved plane.

In this paper, we investigate how the curvature affects the electronic and transport properties of a semiconductor rippled film. In Section II, we develop the formalism necessary to describe the system, including the calculation of the eigenenergies and also the split-operator technique, which will be necessary to propagate the wave

packet trough the structure. In Section III, we discuss the results of band structure (A) and the transmission probability (B) and in Section IV we make the final comments.

II. THEORETICAL MODEL

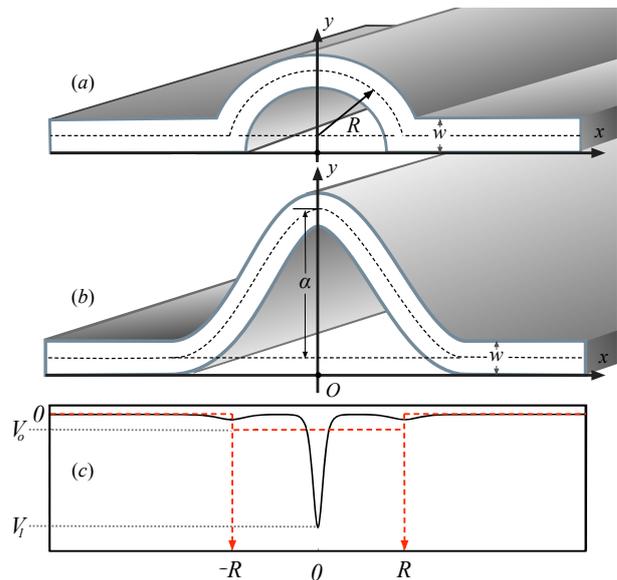


FIG. 1: Sketch of the (a) abrupt and (b) smooth curved films of width w under investigation, with radius R and amplitude α , respectively. The effective geometric potential due to the curvature is shown in (c) for the abrupt (dashed line) and smooth (solid line) structures, where the minimum values $V_0 = -\hbar^2/8m_e R^2$, $V_1 = -\hbar^2 \kappa(0)^2/8m_e$ and $\kappa(x)$ is the x -dependent curvature of the smooth structure. The dashed arrows in $x = \pm R$ represent the discontinuity in the effective potential due to the curvature for the abrupt case.

We consider two different systems consisting of semiconductor films of thickness $w = 60$ Å, as shown in Fig. 1, where the abrupt structure (a) is formed by a constant curvature region of radius R if $-R \leq x \leq R$ and an infinite curvature region (flat region) otherwise, and the smooth structure (b) is formed based on a Gaussian curve defined by $y = \alpha \exp(-x^2/\Gamma^2)$, where α is the amplitude of the curved film and $\Gamma = 130$ Å is the Gaussian width, which determines the width of the curved region. Besides the smoothness, a fundamental difference between these two structures lies in the fact that by varying R , we also change the length of the region of finite curvature in the channel, whereas in the smooth case, as we vary α , we only control the bump amplitude, keeping fixed the length of the finite curvature region along the x axis.

We study the influence of such abrupt and smooth curves on the electronic and transport properties of these systems. Within the effective mass approximation, the Hamiltonian for this system reads

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + eFy + V(x, y) \quad (1)$$

where m_e is the particle effective mass, k_z is the wave vector along z direction, e is the elementary charge, F is an electric field applied along the positive direction of the y axis and the potential $V(x, y)$ is zero inside the semiconductor layer and $V(x, y) = 600$ meV otherwise. The electron confinement in a curved thin-layer gives rise to the well-known geometric potential⁴ due to the structure curvature κ , which is given by $-\hbar^2 \kappa^2 / 8m_e$ and plays an important role for the electronic and transport properties of the system. It is qualitatively represented in Fig.1 (c), where the dashed and the solid lines show the potential for the abrupt (a) ($\kappa = 1/R$) and the smooth (b) films, respectively, with minimum values V_0 and V_1 . The vertical dashed arrows represent the effective potential created by the abrupt change in the curvature at $x = \pm R$ for the circular film - these points in the abrupt case behave like $R \rightarrow 0$ curvature regions, which yield negative divergences in the geometry induced potential.

In order to obtain the eigenstates of these systems, we numerically solve the time independent Schrödinger equation in the xy plane, whereas the z -direction is analytically solved as a plane wave. We divide the xy plane into a grid with n_x and n_y points in x and y directions, respectively, and use the finite differences method⁵ to find

$$\begin{aligned} \psi_{i,j} A_{i,j} + \psi_{i+1,j} B + \psi_{i-1,j} B + \psi_{i,j+1} C + \psi_{i,j-1} C \\ = E \psi_{i,j}, \end{aligned} \quad (2)$$

with

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= \frac{\hbar^2}{m_e \Delta x^2} + \frac{\hbar^2}{m_e \Delta y^2} + V_{i,j} - eFy_j, \\ B &= -\frac{\hbar^2}{2m_e \Delta x^2}, C = -\frac{\hbar^2}{2m_e \Delta y^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

where Δx and Δy are the steps in the x and y axis, respectively. For $\psi = (\psi_{1,1}, \dots, \psi_{1,n_y}, \dots, \psi_{n_x,1}, \dots, \psi_{n_x,n_y})$, Eq. (2) results in an eigenvalue equation with a pentadiagonal Hamiltonian matrix operating on ψ , which can be used to calculate the eigenenergies E of the structure. Assuming a periodic sequence of bumps in the semiconductor plane, we calculate the energy band structure by introducing the k_x wave vector in terms of a spatial displacement along the x direction, giving a periodic condition $\psi_{1,j} = e^{-ik_x W_x} \psi_{n_x,j}$, where the width of the system along the x direction is taken as $W_x = 700$ Å. This results into two extra terms in the penta-diagonal matrix.⁶ The resulting matrix is diagonalized numerically, returning the eigenenergies $E_n(k_x)$ and the eigenfunctions $\psi_{n,k_x}(x)$.

In order to calculate the transport properties of semiconductor films in terms of their curvatures, we inject a Gaussian wave packet propagating to the right, defined by

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} + ik_x^i x \right] \phi_n(y), \quad (4)$$

on the left side of the film, namely, we choose $x_0 = 500$ Å far from the left edge of the region of positive curvature. Here, $\sigma = 200$ Å is the Gaussian width in the x direction, $\phi_n(y)$ is the wave function of the n -th eigenstate in the y direction (in-plane confinement) and $k_x^i = \sqrt{2m_e \varepsilon_i / \hbar^2}$, where ε_i is the packet initial kinetic energy. In reciprocal space, the squared wave function is also a Gaussian, but with a width proportional to $1/\sigma$, which will give an uncertainty of $\Delta E \sim 72, 90$ and 108 meV for the first, second and third energies along the x axis (for $k_x^i, i = 1, 2, 3$, respectively), which are reasonable values for this work.⁷

The electrons confined in the film have subband energies

$$E_n(k_x) = E_n^{(y)} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_z^2)}{2m_e}, \quad (5)$$

where the solution in z is a plane wave with energies $\hbar^2 k_z^2 / 2m_e$. Assuming $k_z = 0$ with a width of $w = 60$ Å along the y axis and conduction band offset $V_e = 600$ meV, it leads to subband energies $E_n^{(y)} = 98, 368$ and 600 meV for $n = 1, 2$ and 3 , respectively. For $k_z \neq 0$, the wave packet will describe a larger path along the film and the eigenenergies will be shifted up. This will give essentially the same qualitative results as the $k_z = 0$ wave packet.

We apply the split operator technique⁸ to find the time evolution of the wave packet in both abrupt and smooth cases. We find the time-dependent wave function by successively applying the operation

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-i\hat{V}\Delta t/2\hbar} e^{-i\hat{K}\Delta t/2\hbar} e^{-i\hat{V}\Delta t/2\hbar} \Psi(\vec{r}, t), \quad (6)$$

where we neglect the error terms of order $O(\Delta t^3)$ due to the noncommutativity of kinetic \hat{K} and potential \hat{V} operators by assuming $\Delta t = 0.2$ fs.

We find the transmission T and reflection R probabilities by integrating the component of the probability current along the propagation axis:

$$T = \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_R, y, t) dy dt \quad (7)$$

and

$$R = - \int_0^\infty \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_L, y, t) dy dt \quad (8)$$

between two fixed points x_R and x_L , located at the right and the left borders, respectively, where the negative signal in R means that the wave packet moves in the opposite direction through the x_L point, and the x component of the probability current is given by

$$J_x(x, y, t) = -i\hbar/2m_e (\Psi^* \partial \Psi / \partial x - \Psi \partial \Psi^* / \partial x). \quad (9)$$

In order to investigate the possibility of observing interband scattering due to the curved region, we analyze the contribution of each subband to the total probability current, which is given by

$$\langle J_x^{(j)} \rangle = \int_0^\infty dt J_x^{(j)}(x_r, t), \quad (10)$$

where

$$J_x^{(j)}(x, t) = -i \frac{\hbar}{2m_e} \left(\overline{P}_j^* \frac{\partial}{\partial x} \overline{P}_j - \overline{P}_j \frac{\partial}{\partial x} \overline{P}_j^* \right) \quad (11)$$

is the time-dependent contribution of each subband, $P_j(x_i, t) = \langle \Psi | \phi_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x_i, y, t) \phi_j(y) dy$ is the projection of the time dependent wave function on the j -th subband, and $\overline{P}_j(x, t) = \langle \phi_j | \Psi \rangle$.

It is also important to mention that, when one imposes that the wave function is zero at the boundaries of the computational box, the wave packet undergoes spurious reflections as it reaches the edges of the system. We therefore add absorbing (imaginary) potential regions close to the left and right edges of the film to calculate transmission and reflection probabilities properly - such absorbing potentials are useful tools to simulate a wave packet that goes out of the computational box as it reaches its edges.⁹

III. RESULTS AND DISCUSSION

We will now apply the theoretical model discussed in the previous Section for studying the energy spectra and transport properties of the rippled films sketched in Fig. 1. For simplicity, we consider films made out of GaAs, where the electron effective mass is assumed to be $m_e = 0.067m_0$.

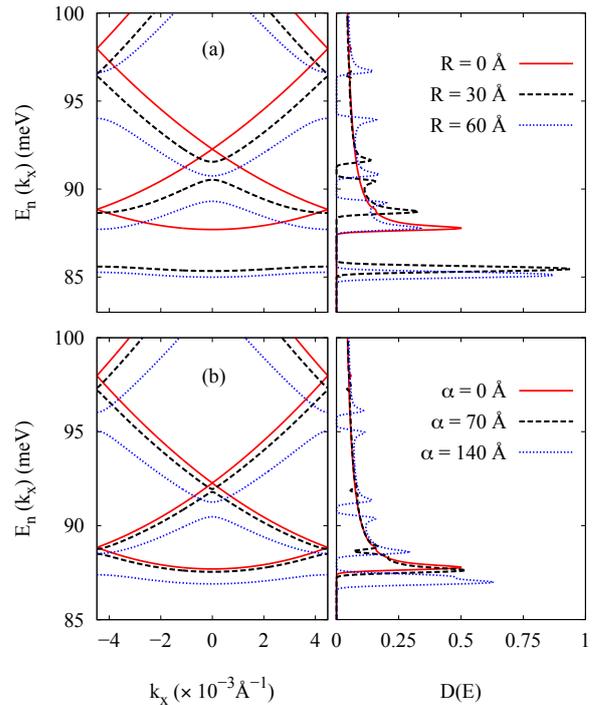


FIG. 2: Band structure and density of states for curved films, considering (a) different values of radius of the abrupt circular ripple, and (b) different heights of the smooth ripple.

A. Band structure of a periodic sequence of ripples

Fig. 2 shows the band structure $E_n(k_x)$ and the corresponding density of states $D(E)$ for different values of radius R , in the abrupt case (a), and amplitude α , in the smooth case (b). Results for $R = 0$ and α are, of course, for a non-curved layer, which are shown here with the electronic dispersion folded into the first Brillouin zone, just for the sake of comparison. We observe that, as the radius R increases, the bands become smoother, the peaks in the density of states become higher and there is an increase in the *energy gap* between them, which is an indication of the particle confinement. The energy gap between the bands increases faster with the curvature R in the abrupt case than with the amplitude α in the smooth case. For instance, the degeneracy breaking of the states $E_n(k_x = 0)$ as the curvature or amplitude increases is more evident in the abrupt case than in the smooth one, showing that it is easier to confine the electrons in the first situation. As a consequence, the peaks in the density of states become more localized, having a higher value of $D(E)$, and the separation between the peaks in the abrupt case (a) becomes more evident than in the smooth case (b).

We verify the curvature induced confinement by showing in Fig. 3 the squared modulus of the wave functions

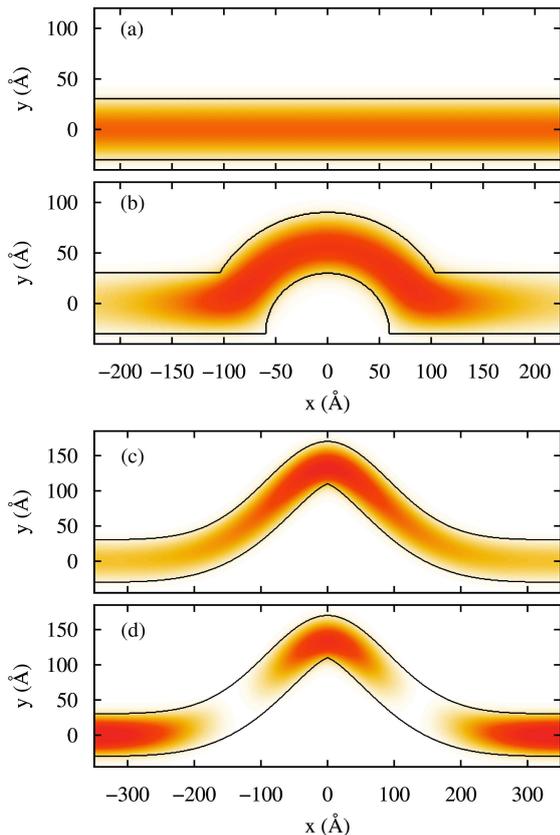


FIG. 3: Contour plots of the squared modulus of the wave functions of low-lying energy states at $k_x = 0$ considering (a) a planar film, and (b) a film with abrupt curvature of radius $R = 60 \text{ \AA}$. In (c) and (d) we see the same type of results for the ground and for the first excited state, respectively, for a structure of smooth curvature in a Gaussian curve of width $\Gamma = 130 \text{ \AA}$ and amplitude $\alpha = 140 \text{ \AA}$.

for $n = 1$ and $k_x = 0$ in a planar film (a), and for curved films in the (a) abrupt case with $R = 60 \text{ \AA}$ and (c) smooth case with $\alpha = 140 \text{ \AA}$. In (d) we see the same as in (c), but for the first excited state. As we mentioned before, the plane has uniform thickness, therefore, as we are able to confine an electron around $x = 0$ by only increasing the radius R (abrupt case) or the amplitude α (smooth case) of the curve, then this effect must be regarded as a pure quantum confinement provided only by the curvature induced potential.

Even for small curvatures, it is possible to force the electronic confinement just by applying a transversal electric field F in the positive direction of the y axis (see Fig.1). This is demonstrated in Fig.4, which shows that, by increasing the electric field, the bands become smoother (left side), which means that there is a larger and more localized peak of the density of states (right side), i.e. particle is more confined. Again, the increase of the gaps and the separation of the peaks of $D(E)$ be-

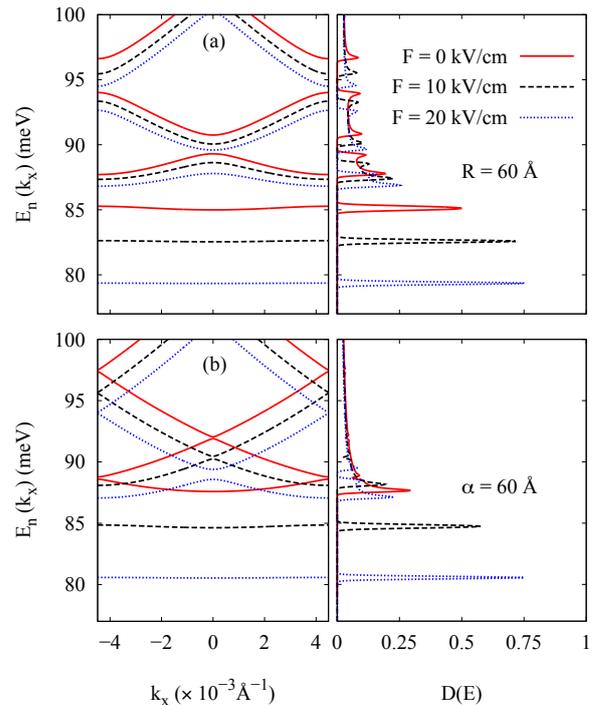


FIG. 4: Band structure (left) and density of states (right) for (a) abrupt and (b) smooth curved films, considering different values of external electric field.

come more evident in the abrupt case than in the smooth case.

The differences between: (a) the first and the second energy levels when k_x is in the edge of the first Brillouin zone ($k_x = k_{min}$), (b) the second and the third levels when $k_x = 0$ and (c) the third and the fourth levels at $k_x = k_{min}$ are shown in Fig.5 as a function of the applied electric field F for $R = 30, 60 \text{ \AA}$ and $\alpha = 60, 140 \text{ \AA}$. We observe that it is possible to adjust the values of electric field to obtain situations where $E_3 = E_2$, for $F \sim 5.6 \text{ kV/cm}$ with $\alpha = 140 \text{ \AA}$, and for $F \sim 13 \text{ kV/cm}$ with $\alpha = 60 \text{ \AA}$ [see Fig. 5 (b)]. It is also possible to obtain $E_4 = E_3$ for $F \sim 14 \text{ kV/cm}$ with $\alpha = 60 \text{ \AA}$ [see Fig. 5(c)]. The gap between E_1 and E_2 , on the other hand, only increases with the electric field, and the increasing rate is higher for larger R and α , which is just a consequence of the fact that the ground state E_1 becomes more confined, namely, with a more flat band, as the external field intensity increases. The $E_2 = E_3$ and $E_4 = E_3$ situations are of particular interest: a recent paper¹¹ has demonstrated that electrons in these gapless regions of the spectrum can be effectively treated as massless Dirac fermions, i.e., their electronic dispersion is approximately linear in the vicinity of these points of the Brillouin zone. Actually, the discussion in this recent paper regards to a superlattice of square well potentials which, if adjusted to some specific combinations of width

and depth, exhibits $E_2 = E_3$ and $E_4 = E_3$ states in the band structure. It is however hard to adjust these parameters in semiconductor heterostructures at will, whereas in the system proposed here, namely, a sequence of ripples in a thin semiconductor film, one can easily tune the confinement by the external electric field in order to obtain these features in the band structure.

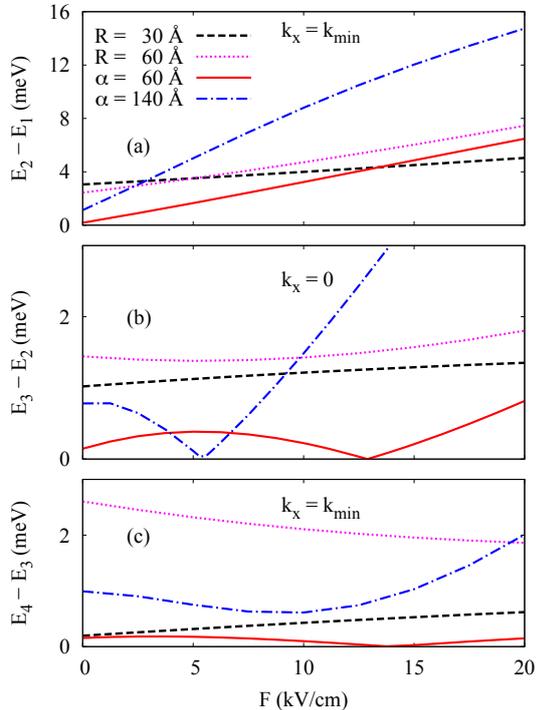


FIG. 5: Differences between: (a) the first and the second energy levels $E_2 - E_1$ at a minimum value of the wave vector $k_x = k_{min}$ in the first Brillouin zone, (b) the second and the third energy levels $E_3 - E_2$ at $k_x = 0$ and (c) the fourth and the third levels $E_4 - E_3$ at $k_x = k_{min}$ as a function of the applied electric field F for different values of radius R and amplitude α .

B. Transmission probability and sub-band scattering

Fig.6 shows the transmission probability as a function of the radius R of the circular curve, for the abrupt case, and the amplitude α of the ripple, in the smooth case. It is also shown the contributions to the probability current due to the first and the second sub-bands. The initial wave packet has a kinetic energy $\varepsilon_i = 250, 260, 270$ and 280 meV. We see that the transmission T decreases as the radius R or the amplitude α increases. We note that these curves have a periodic behavior for the abrupt case, such that the first and the second sub-band contribution have minimum and maximum values as we increase the

curvature radius. This behavior occurs due to resonance effects of the wave packet with the curved region states, and these minimum and maximum values occur for values of R or α slightly greater as the packet kinetic energy ε increases. Due to these effects, the radius $R = 30$ Å is the value that gives a greater contribution in the second sub-band, which is responsible for more than 50% of contribution in that band for $\varepsilon = 280$ meV. On the other hand, in the smooth case, the oscillations disappear, but it is still possible to control the wave packet projection in the second sub-band if we only vary the amplitude value. For $\alpha = 150$ Å, for example, we have a contribution of almost 20% in the second sub-band for $\varepsilon = 280$ meV. The total transmission (d), in this case, practically does not vary in the range of the wave packet kinetic energy from $\varepsilon = 250$ to 280 meV.

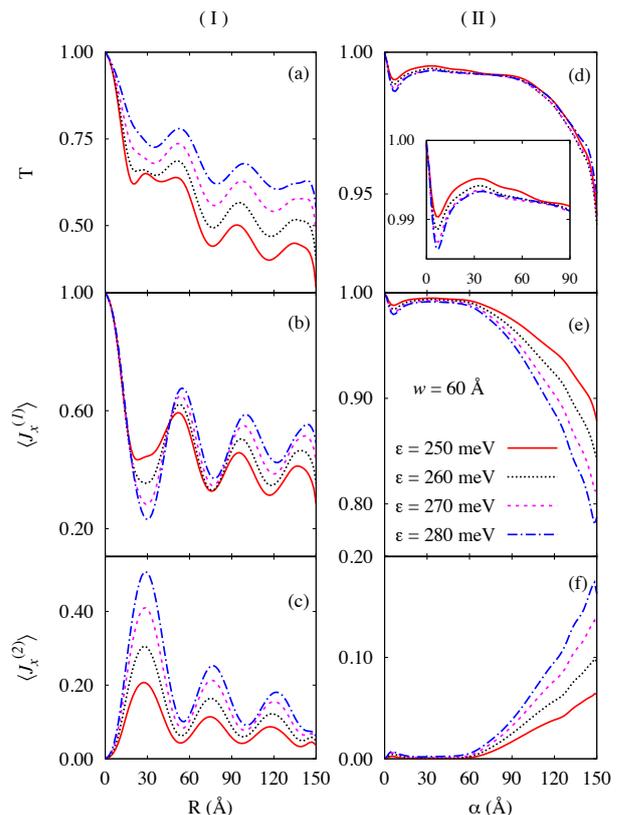


FIG. 6: Transmission probabilities as a function of (a) the radius of a circular ripple and (d) the height of a smooth ripple, for the abrupt (I) and smooth (II) cases, respectively. The contributions of the first ((b) and (e)) and second ((c) and (f)) sub-band states to the transmission probability are also shown.

In Fig.7, these contributions can be better visualized through the snapshots of the wave packet for an initial kinetic energy $\varepsilon = 280$ meV, considering the abrupt (left) and smooth (right) cases for different instants in time.

We used $R = 30 \text{ \AA}$ for the abrupt case and $\alpha = 140 \text{ \AA}$ for the smooth case, which are values that have high contribution of the second sub-band in the transmission. It is more evident that, after the function crosses the finite curvature region, there is a larger contribution for the second sub-band in the abrupt case than for the smooth case for the values of radius and amplitude shown in the figure.

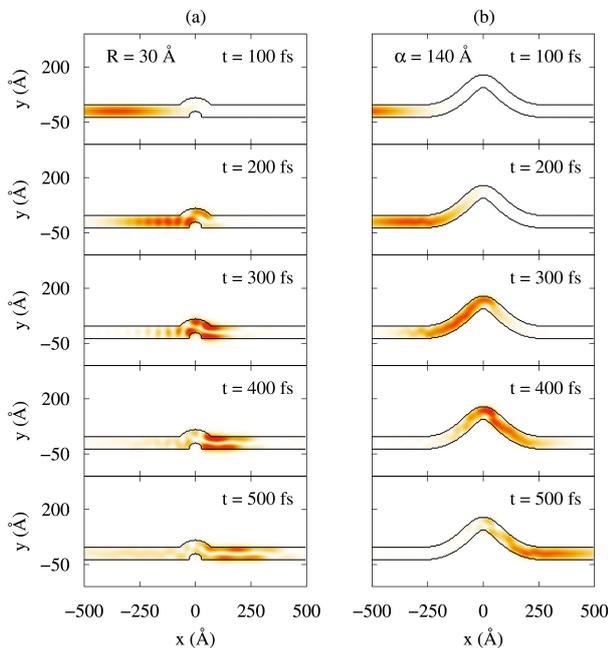


FIG. 7: Snapshots of the $\varepsilon = 280 \text{ meV}$ wave packet scattering by abrupt (left panels) for $R = 30 \text{ \AA}$ and smooth ripples (right panels) for $\alpha = 140 \text{ \AA}$ at five different instants in time t .

IV. CONCLUSIONS

We have investigated how the curvature of a semiconductor film affects its electronic and transport properties. It is demonstrated that, even for a film with uniform width, the geometry-induced potential resulting exclusively from ripples in the film drastically modify its band structure, creating gaps and almost flat bands, due to quantum confinement in the regions of larger curvature. We also demonstrate that, for fixed curvature parameters, such a confinement can be easily tuned by an external electric field. We show that this confinement can produce massless Dirac bands, which are linear dispersion relation, for some values of electric field and amplitude of the smooth structure. The scattering of an electron wave packet by these ripples is also investigated, where we demonstrate that, although the ripples do not significantly affect the transmission probability, which is decreased at most by only $\approx 10\%$ in all cases considered, they are responsible for a significant inter-sub-band transition, specially for moderate values of the ripple height. We believe these results are important to shed light on the curvature effects in previous works considering electrons in curved structures, e.g. v-groove quantum wires, while they are also relevant for a better understanding of the physical properties of semiconductor films and membranes that have been recently synthesized.

Acknowledgments

Discussions with N. S. Almeida are gratefully acknowledged. This work was financially supported by the Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq).

* Electronic address: andrey@fisica.ufc.br

- ¹ R. Alston, S. Iyer, T. Bradley, J. Lewis, G. Cunningham and E. Forsythe, Investigation of the effects of deposition parameters on indium-free transparent amorphous oxide semiconductor thin-film transistors fabricated at low temperatures for flexible electronic applications. *SPIE*, **9005** (2014).
- ² Y. H. Kim, J. S. Heo, T. H. Kim, S Park, M. H. Yoon, J. Kim, M. S. Oh, G. R. Yi, Y. Y. Noh and S. K. Park, Flexible metal-oxide devices made by room-temperature photochemical activation of solgel films. *Nature* **480**,128-133 (2012).
- ³ K. Nomura, H. Ohta, A. Takagi, T. Kamiya, M. Hirano and H. Hosono, Room-temperature fabrication of transparent flexible thin-film transistors using amorphous oxide semiconductors. *Nature* **432**, 488-492 (2004).
- ⁴ R. C. T. da Costa, Constraints in quantum mechanics. *Phys. Rev. A* **25**, 2893 (1982).
- ⁵ L. Lapidus and G. F. Pinder, Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering. John

Wiley & Sons, New York (1999).

- ⁶ S. K. Lele, Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution. *J. Comput. Phys.* **103**, 16-42 (1992).
- ⁷ A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters and B. Szafran, Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width. *Phys. Rev. B* **80**, 125331 (2009).
- ⁸ M. H. Degani and M. Z. Maialle, Numerical Calculations of the Quantum States in Semiconductor Nanostructures. *J. Comput. Theor. Nanosci.* **7**, 454 (2010).
- ⁹ D. E. Manolopoulos, Derivation and reflection properties of a transmission-free absorbing potential. *J. Chem. Phys.* **117**, 21 (2002).
- ¹⁰ D. Kaufman, Y. Berk, B. Dwir, A. Rudra, A. Palevski and E. Kapon, Conductance quantization in V-groove quantum wires. *Phys. Rev. B* **59**, R10 433 (1999).
- ¹¹ F. Carosella, A. Wacker, R. Ferreira and G. Bastard, One-dimensional massless Dirac bands in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B* **89**, 235301 (2014).