



**UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA**

MARCO AURÉLIO TOLEDO DA SILVA

**ESTUDO DAS TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS
QUÂNTICOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE
FOTOLUMINESCÊNCIA**

Londrina
2006

MARCO AURÉLIO TOLEDO DA SILVA

**ESTUDO DAS TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS
QUÂNTICOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE
FOTOLUMINESCÊNCIA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação, em Física da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias

Londrina
2006

MARCO AURÉLIO TOLEDO DA SILVA

**ESTUDO DAS TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS
QUÂNTICOS ATRAVÉS DA TÉCNICA DE
FOTOLUMINESCÊNCIA**

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias
(UEL) *Orientador e presidente da banca*

Prof. Dr. Pedro Pablo Gonzalez Borrero
(UNICENTRO)

Prof. Dr. José Leonil Duarte
(UEL)

Londrina, 6 de abril de 2006.

*Aquele que por meio Dele e para Ele são todas as coisas.
A meus pais Marcemínia e Celso, e minha irmã Marceles, pela base familiar.
A minhas tias, pelo apoio.*

AGRADECIMENTOS

Aquele que por meio Dele e para Ele são todas as coisas, inclusive minha vida.

A meus pais Marcemínia Todelo da Silva e Celso Janneck da Silva.

A meu orientador Ivan Frederico Lupiano Dias.

A meus parentes em geral.

A meus amigos.

A Allen A. Quivy e Tomas E. Lamas pelas amostras.

Ao Departamento de Física da UEL pelo apoio.

A CAPES pelo apoio financeiro.

SILVA, Marco Aurélio Toledo. **Estudo das transições excitônicas em poços quânticos através da técnica de fotoluminescência.** 2006. 149f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2006.

RESUMO

Neste trabalho investigamos, através da técnica de fotoluminescência, um conjunto poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ de largura de 60 Å com concentração de alumínio x variando entre 0.05 e 0.35, preparados pela técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE), sobre um substrato de GaAs orientado na direção [100]. Através da análise dos resultados obtidos identificamos o pico principal do espectro de fotoluminescência e analisamos seu comportamento em função da temperatura e potência de excitação. Fizemos um estudo do comportamento do "gap" de energia (ou da transição excitônica) em função da temperatura (8.5 a 100 K) a 7.0 mW (potência de excitação alta o suficiente para blindar as flutuações de potencial) utilizando os modelos propostos por Vina e Pässler (*tipo-p* e *tipo-p*). Comparamos os parâmetros de ajuste de $E_g(T)$ dos poços com os resultados obtidos para o GaAs "bulk" à mesma potência de excitação e analisamos o efeito do confinamento e da variação da concentração de Al sobre os parâmetros dos diferentes modelos de ajuste.

Palavras-chave: Física da matéria condensada. Poços quânticos. Fotoluminescência. Espectroscopia de luminescência.

SILVA, Marco Aurélio Toledo. **Estudo das transições excitônicas em poços quânticos através da técnica de fotoluminescência.** 2006. 149f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2006.

ABSTRACT

It was analyzed in this work, by means of the photoluminescence technique, a set of quantum wells of Al_xGaAs with a width of 60Å with aluminum x concentration ranging between 0.05 and 0.35, prepared by the MBE (molecular beam epitaxy) technique, on a GaAs substrate guided in the [100] direction. Through the analysis of the obtained results the main peak of the photoluminescence spectrum was identified, and its behavior was analyzed in terms of temperature and excitation power. A study of the gap of energy behavior (or the excitonic transition) due to the temperature (8.5 to 100 K) at 7.0 mW (excitation power high enough to protect the fluctuation of the potential) was carried out, using the models proposed by Viña and Passler (type-p and type-p). The E_g(T) adjustment parameters of the wells were compared with the results obtained for the bulk GaAs to the same excitation power, and the confinement and variation effect of the Al concentration on the parameters of the different models of adjustment were analyzed.

Keywords: Condensed matter. Quantum wells. Photoluminescence.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO GERAL	10
2 MATERIAIS VOLUMÉTRICOS E HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS	16
2.1 INTRODUÇÃO	16
2.2 O GaAs "BULK" E A LIGA TERNÁRIA AlGaAs	16
2.3 HETEROESTRUTURAS DE POÇOS QUÂNTICOS $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$	21
2.3.1 Poço quântico de potencial infinito	24
2.3.2 Poço quântico de potencial finito	25
2.4 FÔNONS: GaAs, AlAs, AlGaAs E POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs	33
2.5 EFEITOS DO CONFINAMENTO SOBRE A VARIAÇÃO DA LARGURA DE LINHA A MEIA ALTURA (FWHM) E DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO EXCITÔNICA (E_g) COM A TEMPERATURA	41
2.5.1 Efeito do confinamento sobre a FWHM(T)	41
2.5.2 Efeito do confinamento sobre a $E_g(T)$	43
3 MODELOS TEÓRICOS	45
3.1 MODELOS QUE DESCREVEM A VARIAÇÃO DO "GAP" DE ENERGIA COM A TEMPERATURA	45
3.1.1 Introdução	45
3.1.2 Modelo de Varshni	47
3.1.3 Modelo de Viña	48
3.1.4 Modelo de Pässler	50
3.1.5 Comparação entre os modelos	52
3.2 INFLUÊNCIA DAS FLUTUAÇÕES DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DAS BARREIRAS SOBRE A FORMA DE LINHA DAS RECOMBINAÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS QUÂNTICOS DE $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$	57
4 TÉCNICAS EXPERIMENTAIS E AMOSTRAS UTILIZADAS	61
4.1 TÉCNICA DE CRESCIMENTO EPITAXIAL POR FEIXE MOLECULAR (MBE)	61
4.2 AMOSTRAS UTILIZADAS	63
4.3 TÉCNICA DE FOTOLUMINESCÊNCIA	64

4.3.1	Introdução	64
4.3.2	Princípios físicos da técnica de fotoluminescência	65
I	Emissões Intrínsecas	67
I.a	Emissão de Éxcitons Livres (EX)	68
I.b	Emissão da Banda de Condução para a Banda de Valência	68
II	Emissões Extrínsecas	69
II.a	Emissão de Éxcitons Ligados	69
II.b	Emissão Banda-Impureza	69
II.c	Recombinação Doador-Aceitador ($D^0 - A^0$)	70
4.4	DESCRIÇÃO DO ARRANJO EXPERIMENTAL DA FOTOLUMINESCÊNCIA	71
5	RESULTADOS EXPERIMENTAIS	73
5.1	INTRODUÇÃO	73
5.2	EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE ALUMÍNIO NA DEPENDÊNCIA COM A TEMPERATURA DAS RECOMBINAÇÕES EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs	77
5.3	FOTOLUMINESCÊNCIA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E DA POTÊNCIA	80
5.4	VARIAÇÃO DA ENERGIA DE RECOMBINAÇÃO EXCITÔNICA COM A TEMPERATURA A POTÊNCIA DE 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$)	89
6	DISCUSSÃO	99
6.1	DISCUSSÃO SOBRE O EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE ALUMÍNIO NA TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS DEPENDENTES DA TEMPERATURA EM BAIXAS POTÊNCIAS DE EXCITAÇÃO	99
6.2	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DA VARIAÇÃO DA ENERGIA DE RECOMBINAÇÃO EXCITÔNICA COM A TEMPERATURA A POTÊNCIA DE 7.0 mW (16 W/cm^2)	102
6.2.1	Comportamento dos parâmetros de ajuste das equações de Viña e Pässler com a concentração de alumínio no intervalo de temperatura de 2 a 300 K	102
6.2.2	Comportamento dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (<i>tipo-p</i> e <i>tipo-p</i>) com a potência de excitação para o GaAs "bulk"	106
6.2.3	Comportamento dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (<i>tipo-p</i> e <i>tipo-p</i>) para o GaAs "bulk" e poços quânticos de AlGaAs/GaAs a 7.0 mW no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K	112

7 CONCLUSÕES.....	124
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	126
PARTICIPAÇÃO EM CONGRESSOS, EVENTOS E PUBLICAÇÕES NO PERÍODO DA DISSERTAÇÃO	149

1 INTRODUÇÃO GERAL

Materiais semicondutores formados a partir de elementos III e V da Tabela Periódica são empregados atualmente na fabricação de uma ampla variedade de estruturas semicondutoras com diferentes propriedades de grande interesse científico e tecnológico. Heteroestruturas III-V podem ser utilizadas tanto para o confinamento óptico, pela formação de uma barreira de índice de refração, como para o confinamento de portadores de carga, através de uma barreira de potencial. Estas propriedades são essenciais para a fabricação de uma série de dispositivos opto-eletrônicos empregados pela indústria moderna. Podemos citar, como exemplo, fotodiodos,^[1.1] lasers,^[1.2,1.3] transistores de alta mobilidade eletrônica – HEMTs (“High Electron Mobility Transistors”),^[1.4] transistores de heterojunção bipolar – HBTs (“Heterojunction Bipolar Transistors”),^[1.5] células solares,^[1.6] etc.

O crescimento de ligas e heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade tornou-se possível devido ao notável desenvolvimento de técnicas de crescimento epitaxial, como a epitaxia por feixe molecular – MBE (“Molecular Beam Epitaxy”), deposição de vapor químico de metal-orgânico – MOCVD (“Metal Organic Chemical Vapour Deposition”) e suas variações. A técnica de MBE é uma das técnicas de preparação de materiais semicondutores mais empregadas na obtenção de filmes monocristalinos com alto grau de pureza. Diversos tipos de materiais semicondutores simples e compostos como Si, Ge, GaAs, AlGaAs, InGaAs, AlGaAsSb, AlGaInAs, GaInAsNSb,^[1.7] etc. e heteroestruturas de AlGaAs/GaAs, InGaAs/GaAs, InGaAs/InGaAlAs:Si, GaInAsNSb/GaAs,^[1.7] etc. podem ser preparados por MBE. Devido à baixa velocidade de crescimento (1 μ m/h) e às condições de ultra-alto-vácuo, esta técnica possibilita o controle do crescimento ao nível de uma monocamada atômica possibilitando a preparação de interfaces abruptas de alta qualidade.^[1.8]

Dentre os diversos tipos de heteroestruturas que podem ser produzidas com a técnica de MBE, o poço quântico – QW (“Quantum Well”) é uma das mais pesquisadas. Um poço quântico pode ser preparado intercalando-se, por exemplo, uma camada de GaAs entre duas camadas de Al_xGa_{1-x}As. A liga ternária Al_xGa_{1-x}As possui “gap” maior que o GaAs e a estrutura criada forma uma região de confinamento bidimensional de portadores de cargas com níveis de energia característicos e distintos do material binário GaAs. As novas propriedades elétricas e ópticas exibidas em poços quânticos, não observadas em compostos encontrados na natureza, levaram as indústrias de

componentes eletroeletrônicos e opto-eletrônicos a utilizarem estas estruturas para a confecção de novos dispositivos de estado sólido.^[1.9,1.10]

Processos de emissão e absorção à baixas temperaturas em materiais semicondutores (“bulk”) de “gap” direto e em heteroestruturas como poços quânticos são dominados por éxcitons – estruturas geradas por interação coulombiana entre elétrons e buracos. Em heteroestrutura de poços quânticos como, por exemplo, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ as transições excitônicas dominam até a temperatura ambiente devido ao aumento da energia de ligação excitônica resultante do confinamento. Este é um dos principais fatores para a aplicação em optoeletrônica. O confinamento quase-2D de portadores de carga permite ainda o estudo de novas propriedades físicas, como o efeito Stark de confinamento quântico^[1.11] e o efeito Hall quântico.^[1.1] Em resumo, a estrutura de poço quântico é de extrema importância tanto para a preparação de dispositivos de estado sólido de grande interesse tecnológico e industrial quanto para o estudo acadêmico, devido às novas propriedades físicas.

A dependência com a temperatura do “gap” de energia é uma propriedade básica de materiais e heteroestruturas semicondutoras. Um conhecimento desta dependência de $E_g(T)$ é de grande importância, acima de tudo, para aplicação em dispositivos optoeletrônicos que serão utilizados em um grande intervalo de temperatura. O bom “design” destes dispositivos requer, entre outras coisas, um detalhado estudo experimental de $E_g(T)$ entre uma temperatura relativamente baixa até uma alta temperatura ($T \sim 300$ K) em combinação com uma representação analítica fisicamente adequada e um ajuste numérico preciso dos dados experimentais.

O “gap” de energia ou as transições excitônicas em materiais “bulk” e heteroestruturas depende da temperatura. A variação do “gap” de energia em função da temperatura ocorre devido à contribuição de dois mecanismos distintos: a interação elétron-fônon (IEF) e a expansão térmica da rede (ETR).^[1.12-1.15] De modo geral a contribuição da expansão térmica para a variação de $E_g(T)$ é pequena comparativamente à contribuição da interação elétron-fônon. A contribuição da dilatação térmica, à temperatura ambiente, é da ordem de 2% a 20%, dependendo do material semiconductor.^[1.15,1.16] Assim, devido à “pequena” contribuição da dilatação térmica para a variação total do “gap” de energia com a temperatura, diversos modelos de ajuste para a $E_g(T)$ foram propostos considerando somente o mecanismo da interação elétron-fônon como uma primeira aproximação para o entendimento do comportamento de $E_g(T)$.^[1.17-1.20]

A dependência do “gap” de energia ou das transições excitônicas com a temperatura apresenta diferentes comportamentos dependendo da faixa de temperatura

considerada. À baixíssimas temperaturas ($T < 10$ K) o comportamento assintótico para $T \rightarrow 0$ é do tipo T^4 . Pode-se verificar isto sem o uso de qualquer equação empregando o modelo de Debye em que o comportamento assintótico previsto (e demonstrado experimentalmente) do calor específico (a derivada da energia em relação à T) é $\sim T^3$.^[1.21,1.22] Com o aumento da temperatura o comportamento de $E_g(T)$ ainda pode ser representado por uma expressão do tipo T^p onde p varia entre 2 e 3.33.^[1.23] A altas temperaturas o “gap” de energia decresce linearmente com a temperatura.^[1.21-1.23]

Existem na literatura alguns modelos que tentam descrever o comportamento do “gap” de energia dos materiais semicondutores em função da temperatura. Alguns modelos são puramente empíricos servindo apenas para ajustar os dados experimentais sem qualquer significado físico dos parâmetros obtidos através dos ajustes. Neste contexto, podemos citar o modelo de Varshni^[1.24] proposto em 1967. Outros modelos, entretanto, são semi-empíricos (com equações que ajustam os dados experimentais definidas empiricamente, mas contendo em suas estruturas a distribuição estatística de Bose-Einstein, a qual leva em consideração a interação elétron-fônon). Tais modelos semi-empíricos, geralmente conhecidos na literatura como expressões microscópicas, são os modelos de Manoogian e Leclerc^[1.25] (1979), Viña e colaboradores^[1.26] (1984) e Pässler^[1.17] (1997). Os três primeiros modelos (Varshni, Manoogian e Viña), foram empregados historicamente para descrever a variação do “gap” de energia com a temperatura em diversos materiais semicondutores como o Si e o Ge,^[1.25,1.27] ligas binárias como o GaAs^[1.28] e o InP^[1.29] e em ligas ternárias como o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,^[1.30] $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,^[1.31] $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ^[1.32] e $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$.^[1.33] Foram empregados ainda para descrever o comportamento das transições excitônicas em função da temperatura em poços quânticos de AlGaAs/GaAs^[1.34-1.37] e poços quânticos tensionados de InGaAs/GaAs^[1.38] e InAsP/InP.^[1.39]

Em ligas ternárias como $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ os parâmetros de ajuste nas equações dos diferentes modelos para ajustar $E_g(T)$ variam com a concentração de Al.^[1.19,1.40,1.41] Vários trabalhos mostram que os parâmetros de ajuste crescem com o aumento da concentração de Al pelo menos no intervalo de $0 < x < 0.45$.^[1.19,1.40,1.41] Em poços quânticos de AlGaAs/GaAs os parâmetros parecem inicialmente decrescer com a introdução da barreira (do confinamento) e depois crescer com o aumento da concentração de Al de modo similar ao obtidos para a liga ternária “bulk”, material que constitui a barreira.^[1.42] Estes resultados foram obtidos por S. A. Lourenço *et al.*^[1.41] para poços quânticos de 60 e 121 Å com concentração de Al na barreira variando entre $x = 0.17$ e $x = 0.40$. No estudo realizado por S. A. Lourenço *et al.*^[1.41] foi utilizado um conjunto de poços quânticos com apenas três concentrações de Al na barreira (17%, 30% e 40%) e um dos poços tinha

espessura diferente dos demais (55 Å ao invés de 60 Å). Esta pequena quantidade de dados experimentais e a diferença na largura de um dos poços podem mascarar o real comportamento dos parâmetros quando aumentamos a concentração de Al. Os dados experimentais para o GaAs “bulk” utilizados para comparação com os resultados dos poços quânticos foram redigitalizados do trabalho realizado por Logothetidis *et al.*^[1.19] O fato dos dados experimentais para o GaAs “bulk” terem sido obtidos em outras condições experimentais é um fator a mais a prejudicar a comparação entre estes resultados e os resultados do poço quântico. Isto nos motivou a um estudo mais sistemático do fenômeno com um número maior de amostras de poços quânticos com alturas variadas da barreira de confinamento.

A influência da concentração de Al em poços quânticos de AlGaAs/GaAs sobre o comportamento das transições excitônicas em função da temperatura foi mostrada em trabalhos recentes.^[1.40,1.41] Nestes trabalhos ficou evidente que a penetração da função de onda do éxciton na barreira de potencial permite o acoplamento deste com os fônons do material constituinte da barreira, no caso a liga AlGaAs. A energia dos fônons LO e a intensidade da interação éxciton-fônon-LO aumentam com a concentração de Al, o que leva a um maior valor da largura de linha da emissão excitônica e reforça a variação do gap de energia com T, principalmente na região de altas temperaturas ($T > 150$ K) onde o coeficiente de variação do “gap” com T (dE/dT) é constante. Na região de baixas temperaturas a interação éxciton-fônon é determinada pelos fônons acústicos LA que, entretanto não dependem da concentração de Al. Assim, um estudo da variação do “gap” de energia com a temperatura na região de baixa temperatura ($8.5 \text{ K} \leq T \leq 100 \text{ K}$) no material “bulk” GaAs e em poços quânticos de AlGaAs/GaAs com várias concentrações de Al nos permite: *a*) analisar os efeitos do aumento de x sobre os parâmetros de ajuste de $E_g(T)$; *b*) comparar os resultados obtidos para o material “bulk” (sistema 3D), que constitui o poço, com os resultados obtidos para o poço e *c*) analisar o efeito da interação elétron-fônon acústico.

Em quase todas as heteroestruturas de semicondutores, variações aleatórias na largura do poço quântico e na composição da liga causam flutuações no potencial de confinamento para os portadores de carga nas bandas de valência e de condução, que afetam as propriedades ópticas destas heteroestruturas. Este assunto foi recentemente estudado em uma grande variedade de poços quânticos e super-redes de diversos materiais, tais como ZnS/ZnSe,^[1.42] InGaP/AlGaInP,^[1.43] InGaP/InP,^[1.44] GaInNAs/GaAs,^[1.45] GaN/AlGaIn,^[1.43] GaAs/InGaP,^[1.46] ZnO/MgZnO,^[1.47] e InGaAs/GaAs.^[1.48]

As flutuações na largura do poço (micro-rugosidades na interface) e na composição química das ligas que compõem o material do poço de potencial e/ou da barreira de confinamento são fontes de desordem que modulam o perfil local do potencial de confinamento da heteroestrutura. Estas desordens possuem um forte efeito sobre o movimento dos portadores e as recombinações radiativas para baixas temperaturas e baixas potências de excitação são geralmente dominadas por éxcitons localizados.^[1.49-1.60] As flutuações do potencial de confinamento resultam em um prolongamento (“band-tail”) na densidade de estados excitônica (DOS) abaixo da distribuição dos estados fundamentais da heteroestrutura. As recombinações radiativas dos estados do “band-tail” são deslocadas para baixas energias com relação às energias de recombinação dos éxcitons deslocalizados e o espectro de fotoluminescência a baixas temperaturas e baixas intensidades de excitação é assimétrico com um rabo exponencial do lado de baixa energia. Tal forma de linha do espectro de PL tem sido usada como uma impressão digital das recombinações de éxcitons localizados nas desordens microscópicas presentes no material semiconductor.^[1.50,1.51] Nas amostras discutidas nesse trabalho, de baixa magnitude de flutuação de potencial, observa-se que quando a temperatura aumenta, ocorre inicialmente um deslocamento do pico de PL para energia maior (“blue-shift”) até um determinado valor máximo e, em seguida, com o aumento gradual da temperatura, um deslocamento regular para energia menor (“red-shift”), típico de materiais semicondutores sem flutuação de potencial. Com o aumento da intensidade de excitação podemos blindar ou saturar as flutuações e, em tese, analisar somente a influência da interação elétron-fônon na variação do “gap” com a temperatura.

Os efeitos das flutuações do potencial de confinamento sobre o processo de recombinação excitônica em poços quânticos são comumente analisados em termos das flutuações da largura do QW.^[1.47,1.52-1.61] Flutuações da composição química da barreira (AlGaAs no caso do sistema AlGaAs/GaAs, por exemplo) são freqüentemente desconsideradas ou deixadas em segundo plano. O estudo é geralmente conduzido pela dependência da largura de linha das recombinações excitônicas em função da largura do poço^[1.68,1.69] ou pela posição da energia do pico de PL (E_{PL}) em função da temperatura.^[1.47,1.61-1.67]

Neste trabalho, realizamos um estudo das propriedades ópticas de um conjunto de três amostras contendo, em cada, dois poços quânticos de mesma largura (60 Å) e diferentes concentrações de Al na barreira ($x = 0.05; 0.11; 0.14; 0.23; 0.27$ e 0.35), crescidas pela técnica de MBE sobre substrato de GaAs, no Instituto de Física da Universidade de São Paulo. Para esta investigação, realizamos medidas de fotoluminescência (PL), em função da temperatura e da potência de excitação. Através da análise dos resultados obtidos com a

utilização dessa técnica, identificamos o pico principal do espectro de fotoluminescência dessas amostras. Realizamos uma discussão acerca da origem desse pico, bem como de seu comportamento em função da temperatura e da potência de excitação. Confirmamos os resultados obtidos através da comparação dos picos com as previsões de cálculos teóricos e a concordância com os resultados de outros trabalhos encontrados na literatura. Analisamos os espectros de fotoluminescência obtidos em potências de excitação suficientemente baixas onde os efeitos das flutuações do potencial de confinamento fossem relevantes para os espectros de PL. Fizemos um estudo do comportamento do “gap” de energia (ou da transição excitônica) em função da temperatura a 7.0 mW (potência de excitação alta o suficiente para blindar as flutuações de potencial) utilizando os modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*). Comparamos os parâmetros de ajuste de $E_g(T)$ dos poços com os resultados obtidos para o GaAs “bulk” à mesma potência de excitação.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 apresentamos de forma resumida a teoria quântica para heteroestruturas semicondutoras, tratando em particular dos poços quânticos e um breve comentário sobre fônons nos GaAs e AlAs, na liga AlGaAs e no poço quântico AlGaAs/GaAs. No capítulo 3 apresentamos uma revisão dos modelos mais utilizados para descrever a variação do “gap” de energia ou das transições excitônicas com o aumento da temperatura. O capítulo 4 é destinado a uma breve exposição das principais características da técnica utilizada para o crescimento de nossas amostras (MBE), da estrutura física de cada amostra e da técnica utilizada na caracterização das amostras. No capítulo 5 apresentamos os resultados experimentais obtidos pela técnica de fotoluminescência com a variação da potência de excitação e temperatura. O capítulo 6 é dedicado à análise e discussão dos resultados experimentais e, finalmente, o capítulo 7 é dedicado às conclusões.

2 MATERIAIS VOLUMÉTRICOS E HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS

2.1 INTRODUÇÃO

Com o advento das modernas técnicas de crescimento epitaxial como, por exemplo, MBE “Molecular Beam Epitaxy”, CBE “Chemical Beam Epitaxy” e MOCVD “Metal-Organic Chemical Vapour Deposition” tornou-se possível a fabricação de estruturas constituídas por camadas extremamente finas (da ordem de algumas camadas atômicas) de materiais semicondutores, com interfaces extremamente abruptas. Na maioria dos casos, as propriedades especiais das heteroestruturas semicondutoras que contém interfaces se devem ao comportamento dos portadores de carga (elétrons e buracos) em potenciais de confinamento previamente concebidos, visando alguma aplicação prática.^[2.1]

O GaAs e o AlGaAs compõem uma das mais importantes famílias de materiais semicondutores usados como constituintes de uma série de heteroestruturas de enorme emprego em pesquisa básica e em aplicações tecnológicas.^[2.1-2.6] A liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é um componente muito utilizado como barreira em heteroestruturas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs, podendo variar o valor da concentração de Al na liga obtendo-se diferentes alturas de barreiras sem provocar o surgimento de tensões entre os materiais. Além disso o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é um material de “gap” direto até concentrações de Al de aproximadamente 0.4, permitindo a fabricação de heteroestruturas de alta eficiência em regiões de energia de grande interesse tecnológico.

Neste capítulo desenvolveremos uma breve revisão das principais propriedades do GaAs e da liga ternária AlGaAs “bulk” e da heteroestrutura de poço quântico formada por essas ligas.

2.2 O GaAs “BULK” E A LIGA TERNÁRIA AlGaAs

Os materiais semicondutores III-V como o GaAs “bulk” e a liga ternária AlGaAs se cristalizam em uma estrutura “zinc-blend”. Esta estrutura cristalina consiste de duas redes cúbicas de face centrada interpenetradas e deslocada entre si por um quarto da

diagonal principal do cubo. A célula elementar contém dois átomos, um localizado na origem $(0,0,0)$ e outro em $(a/4, a/4, a/4)$ onde a é o parâmetro de rede. Se os dois átomos da base forem idênticos, a estrutura é chamada de estrutura do diamante. Semicondutores tais como Si, Ge e C pertencem a esta categoria. A Figura 2.1 fornece os detalhes da estrutura “zinc-blend”.

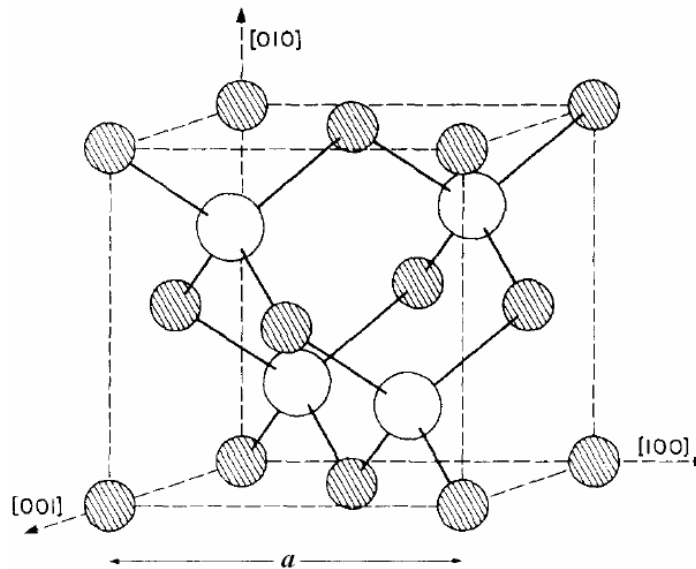


Figura 2.1 – Estrutura cristalina “zinc-blend” para o GaAs. A estrutura consiste de duas redes cúbicas de face centrada interpenetradas com o deslocamento de uma delas por uma distância de $(a/4)$ ao longo da diagonal principal do cubo unitário de volume a^3 que contém quatro moléculas de GaAs.^[2,8]

A rede recíproca da rede cúbica de face centrada é uma rede cúbica de corpo centrado. A primeira zona de Brillouin desta rede recíproca é um octaedro truncado. Na Figura 2.2 apresentamos a primeira zona de Brillouin e alguns pontos de alta simetria.

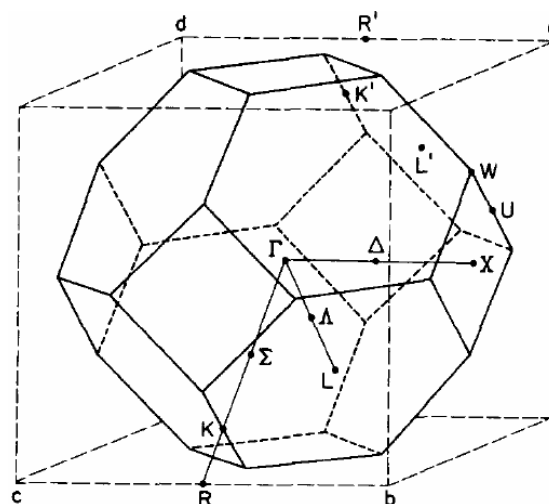


Figura 2.2 – Primeira zona de Brillouin da rede cúbica de face centrada. Esta célula unitária com seus pontos e suas linhas de alta simetria é muito importante para a física de semicondutores.^[2,8]

A estrutura de bandas eletrônicas do GaAs é apresentada na Figura 2.3. O mínimo da banda de condução e o topo da banda de valência para os dois compostos estão localizados no ponto de alta simetria $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$ da zona de Brillouin e têm a forma característica dos semicondutores de estrutura cristalina do tipo “zinc-blend”. Na ausência de acoplamento spin-órbita, as três bandas de valência (que se originam dos orbitais tipo p) são degeneradas no ponto $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$. O acoplamento spin-órbita levanta esta degenerescência em seis níveis que originam o quadrupeto (simetria Γ_8) e o duplete (simetria Γ_7). Em semicondutores III-V o quadrupeto tem sempre energia maior que o duplete. A separação de energia entre eles é representada pelo símbolo (Δ). Próximo a $\mathbf{k} = 0$ os estados de buracos apresentam curvaturas diferentes. A diferença na curvatura destes estados – de acordo com a definição de massa efetiva: $1/m^* \equiv (1/\hbar^2)(d^2E(\mathbf{k})/d\mathbf{k}^2)$ onde m^* é a massa efetiva dos portadores de carga na rede cristalina – faz com que as massas efetivas dos buracos que ocupam tais estados sejam distintas. Os buracos de massa maior são denominados buracos pesados e geralmente identificados por hh – “heavy hole” – e os buracos de massa menor são denominados buracos leves e identificados por lh – “light hole”. A transição fundamental para materiais III-V de “gap” direto envolve o extremo da banda de valência Γ_8^V e o extremo da banda de condução Γ_6^C e é representada por E_g^Γ . No GaAs $E_g^\Gamma = 1.5194$ eV para $T = 2$ K e 1.424 eV para $T = 300$ K. No AlAs, o “gap” não é direto, ou seja, o menor intervalo de energia entre o fundo da banda de condução e o topo da banda de valência não ocorre no mesmo vale, Γ , mas entre os vales X (na BC) e Γ (na BV) obtendo-se, $E_g^{\Gamma_{15V}-X_{1C}} = 2.229$ eV para $T = 4$ K e 2.153 eV para $T = 300$ K. As principais propriedades dos extremos da banda de condução e da banda de valência para o binário GaAs estão resumidas no trabalho de Blakemore.^[2.7] Os valores de diversos parâmetros dos compostos binários de semicondutores III-V podem ser encontrados em referência especializada.^[2.9]

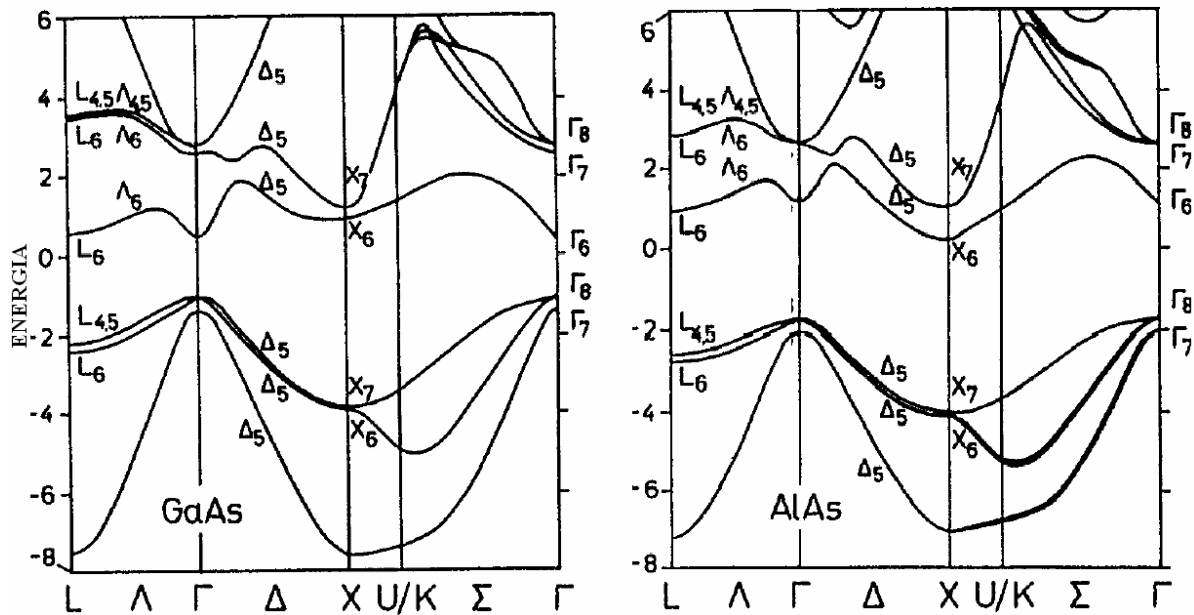


Figura 2.3 – Estrutura de bandas do GaAs e do AlAs no espaço dos momentos.^[2.8]

Vários parâmetros de compostos ternários, tais como parâmetro de rede (a), massa efetiva do elétron e dos buracos (m_e^*, m_h^*), constante dielétrica (ϵ), podem ser obtidos por meio de interpolação simples, como função linear dos parâmetros de compostos binários (lei de Vegard) ou como função dos binários acrescentando-se as correções introduzidas por medidas experimentais. Estas medidas introduzem os denominados termos de “bowing”: termos quadráticos nas expressões que mostram a dependência de determinados parâmetros com a composição relativa dos materiais.

Para o parâmetro de rede (a) da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ podemos utilizar uma interpolação linear simples obtendo-se (em Å):

$$a^{\text{AlGaAs}}(x) = 5.6535 + 0.0094x \quad (2.1)$$

Da Equação 2.1 podemos verificar que a diferença entre o parâmetro de rede do GaAs e o do AlAs é de apenas 0.17% a $T = 300 \text{ K}$.^[2.8] O bom casamento entre os parâmetros de rede destes dois materiais para qualquer valor de x , a diferença da energia de “gap” (que é controlada pela proporção de alumínio na liga) e a excelente mobilidade eletrônica do GaAs são as principais características que tornaram estes materiais os mais utilizados na preparação de heteroestruturas.

As massas efetivas de elétrons e buracos leve e pesado para a liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ podem ser dadas por (em termos m_0 – massa de repouso do elétron = 9.109×10^{-31} Kg):

$$\begin{aligned} m_e^* &= 0.067 + 0.083x \\ m_{hh}^* &= 0.62 + 0.014x \\ m_{lh}^* &= 0.087 + 0.078x \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde m_e^* , m_{hh}^* e m_{lh}^* são as massas efetivas do elétron, do buraco pesado e do buraco leve, respectivamente.

Para obter-se o “gap” de energia da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é necessário utilizar o termo de “bowing”, obtendo-se:

$$E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}(x) = xE_g^{\text{AlAs}} + (1-x)E_g^{\text{GaAs}} - x(1-x)C^{\text{AlGaAs}} \quad (2.3)$$

onde C^{AlGaAs} é a constante de “bowing” para o ternário em análise. Considerando os dados dos termos de “bowing” para os três principais vales da banda de condução (Γ , X, L), medidos por S. Adachi,^[2.11] podemos obter $E_g(x)$. A temperatura de 300 K tem-se (em meV):

$$E_g^\Gamma(x) = 1420 + 1155x + 370x^2 \quad (2.4a)$$

$$E_g^X(x) = 1910 + 5x + 245x^2 \quad (2.4b)$$

$$E_g^L = 1710 + 690x \quad (2.4c)$$

Considerando, de acordo com S. Adachi,^[2.11] que as constantes de “bowing” não dependem da temperatura, em $T = 2$ K tem-se (em meV):

$$E_g^\Gamma(x) = 1519.4 + 1420x + 370x^2 \quad (2.5a)$$

$$E_g^X(x) = 1987 + 3x + 245x^2 \quad (2.5b)$$

$$E_g^L = 1815 + 690x \quad (2.5c)$$

Na Figura 2.4 apresentamos o comportamento do “gap” em função da concentração de alumínio para $T = 300$ K e $T = 2$ K, obtida através das Equações 2.4 e 2.5.

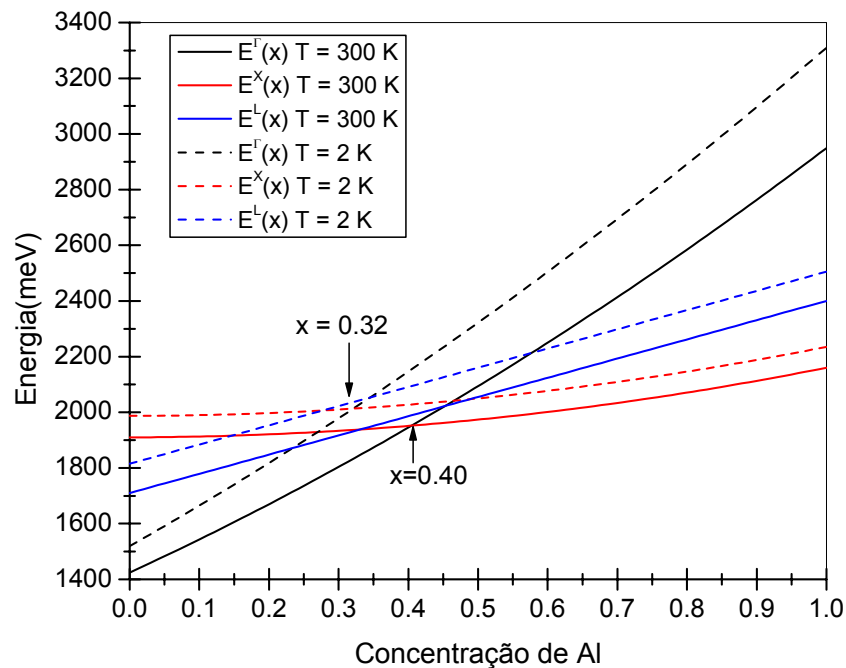


Figura 2.4 – Variação do “gap” de energia da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com a concentração de alumínio para os vales Γ , X e L. As curvas representam o comportamento do “gap” de energia direto (vale Γ) e indireto (vales X e L) em função da concentração de alumínio para $T = 300\text{ K}$ (curvas sólidas) e $T = 2\text{ K}$ (curvas tracejadas).

A transição de “gap” direto, (Γ), para “gap” indireto, (X), a $T = 300\text{ K}$ ocorre em $x \sim 0.40$ e a $T = 2\text{ K}$ em $x \sim 0.32$. Embora o AlGaAs seja um material muito estudado, existem na literatura diferentes expressões para E_g^Γ e E_g^X . Isto ocorre em função da dispersão de valores encontrados para os termos de “bowing” e para os valores dos “gaps” obtidos por diferentes técnicas.^[2.7,2.11,2.12] Entretanto, a transição de “gap” direto para indireto é geralmente considerada no intervalo $0.40 < x < 0.45$, para $T = 300\text{ K}$.^[2.7,2.13,2.14]

2.3 HETEROESTRUTURAS DE POÇOS QUÂNTICOS $\text{al}_x\text{ga}_{1-x}\text{as/gaas}$

Dentre os diversos tipos de heteroestruturas que podem ser produzidas com a técnica de MBE, o poço quântico é uma das mais pesquisadas na atualidade. Um poço quântico pode ser preparado intercalando-se camadas de materiais semicondutores de “gaps” diferentes. Considerando-se o material A como o de “gap” menor e o material B

como o de “gap” maior podemos formar uma região de confinamento bidimensional de portadores de cargas com níveis de energia característicos e distintos dos materiais A e B. Na Figura 2.5 apresentamos o perfil do potencial criado por esta heteroestrutura. A espessura da camada de GaAs na direção de crescimento (z) define a região do poço quântico e é representada por L_w . A espessura da camada de AlGaAs define a região da barreira e é representada por L_B . Considerando E_g^{AlGaAs} o “gap” do material ternário AlGaAs e E_g^{GaAs} o “gap” do material binário GaAs, a diferença de energia entre os “gaps” dos dois semicondutores é dada por:

$$\Delta E_g = E_g^{\text{AlGaAs}} - E_g^{\text{GaAs}} \quad (2.6)$$

Esta diferença de energia (ΔE_g) não está distribuída de forma equitativa entre a BC e a BV. Os valores de ΔE_c e ΔE_v (“offset” da banda de condução e da banda de valência) para o poço de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ são dados por [2.12,2.13]:

$$\Delta E_c = 0.70\Delta E_g \quad (2.7a)$$

$$\Delta E_v = 0.30\Delta E_g \quad (2.7b)$$

onde ΔE_c pode variar de 0.65 a 0.70 ΔE_g , dependendo da referência.

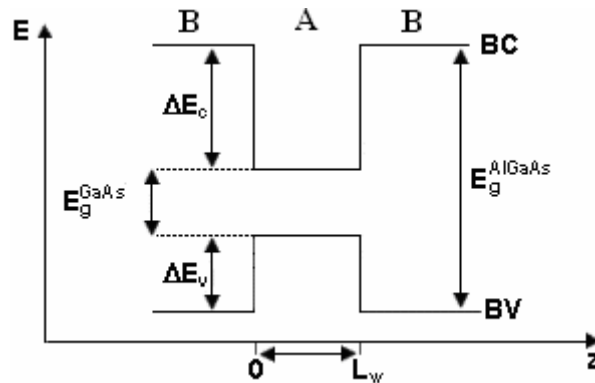


Figura 2.5 – Representação do perfil de potencial do poço quântico; z é a direção de crescimento do poço quântico, L_w representa a largura do poço. E_g^{AlGaAs} é o “gap” do material ternário AlGaAs e E_g^{GaAs} é o “gap” do material binário GaAs. ΔE_c e ΔE_v são o “offset” da banda de condução (BC) e o “offset” da banda de valência (BV) respectivamente.

A diferença de energia “ ΔE_g ” da Equação 2.6 define um perfil de potencial unidimensional $U(z)$ atrativo para os portadores na região $0 < z < L_w$, criando um poço de potencial para elétrons na banda de condução e um poço de potencial para buracos na banda de valência.

O potencial descrito acima restringe o movimento dos portadores de carga (elétrons e buracos) na direção normal às interfaces (direção z), permanecendo livre o movimento nas direções x e y . Desta maneira o movimento das partículas na direção z é quantizado. Essa quantização dos portadores de carga na direção z provoca o surgimento dos níveis de energias para elétrons (n_1, n_2, \dots, n_n), buracos leves (lh_1, lh_2, \dots, lh_3) e buracos pesados (hh_1, hh_2, \dots, hh_n).

No caso de heteroestruturas, os níveis de energia da banda de condução podem ser facilmente calculados através da resolução da equação de Schroedinger independente do tempo.

A equação de Schroedinger dependente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \chi(z,t)}{\partial z^2} + U(z)\chi(z,t) = i\hbar \frac{\partial \chi(z,t)}{\partial t}, \quad (2.8)$$

onde $\chi(z,t)$ é a função de onda. Se $U(z)$ não varia com o tempo, podemos escrever a função de onda como:

$$\chi(z,t) = \psi(z)\varphi(t) \quad (2.9)$$

substituindo a Eq. (2.9) em (2.8) e dividindo ambos os lados pela Eq. (2.8) temos:

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = E\varphi(t) \quad (2.10)$$

cuja solução é do tipo:

$$\varphi(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \quad (2.11)$$

onde C é uma constante e

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + U(z)\psi(z) = E\psi(z). \quad (2.12)$$

Esta equação é conhecida como equação de Schroedinger independente do tempo.

Vamos tratar dois casos distintos: (i) o caso do poço de potencial infinito, onde não há penetração da função de onda na barreira e (ii) o caso do poço de potencial finito, onde ocorre a penetração da função de onda na barreira.

2.3.1 Poço Quântico de Potencial Infinito

Neste item iremos discutir o poço quântico de potencial infinito, como mostrado na Figura 2.6.

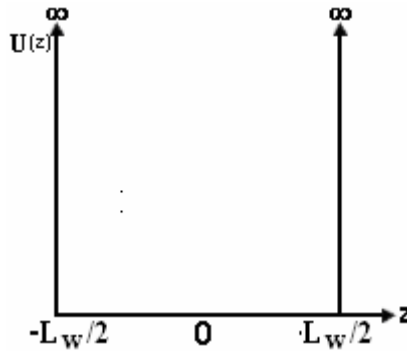


Figura 2.6 – Poço quântico de potencial infinito.

Considerando o centro do poço quântico como o centro de coordenadas, o potencial toma a forma:

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \text{para } -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ \infty & \text{para } z \leq -\frac{L_w}{2} \text{ ou } z \geq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (2.13)$$

A equação de Schroedinger independente do tempo, unidimensional, na região do poço é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = E\psi(z) \quad (2.14)$$

onde $E > 0$.

Fazendo:

$$K_w^2 = \frac{2m^*E}{\hbar^2} \quad (2.15)$$

temos:

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = -K_w^2\psi(z) \quad (2.16)$$

Esta equação diferencial tem como soluções, exponenciais imaginárias do tipo $\exp(\pm iK_w z)$.

A função de onda $\psi(z)$ pode ser descrita como a combinação linear de duas ondas planas propagando em sentidos opostos.

$$\psi(z) = A \exp(iK_w z) + B \exp(-iK_w z). \quad (2.17)$$

Podemos obter uma onda estacionária fazendo $A = B$ ou $A = -B$, resultando em funções de onda do tipo

$$\psi(z) = C \cos(K_w z) \quad (2.18a)$$

$$\psi(z) = C' \sin(K_w z) \quad (2.18b)$$

Aplicando as condições de contorno nestas funções de onda obtemos:

$$K_w = \frac{n\pi}{L_w}, \text{ com } n = 1, 2, 3, 4\dots \quad (2.19)$$

Substituindo a Eq. (2.18) na Eq. (2.15), encontramos os autovalores de energia:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* L_w^2}. \quad (2.20)$$

Este tipo de potencial restringe o movimento dos portadores de carga (elétrons e buracos) na direção normal às interfaces (direção z), permanecendo livre o movimento nas direções x e y . Assim a energia total é dada por:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* L_w^2} + \frac{\hbar^2 (K_x^2 + K_y^2)}{2m^*} \quad (2.21)$$

que é a soma dos autovalores de energia com a energia correspondente ao movimento nas direções x e y , criando assim uma sub-banda de energia.^[2.15]

2.3.2 Poço Quântico de Potencial Finito

Considerando, novamente, o centro do poço quântico como o centro de coordenadas (Figura 2.7), o potencial toma a forma:

$$U(z) = \begin{cases} -\Delta E & \text{para } -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ 0 & \text{para } z \leq -\frac{L_w}{2} \text{ ou } z \geq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (2.22)$$

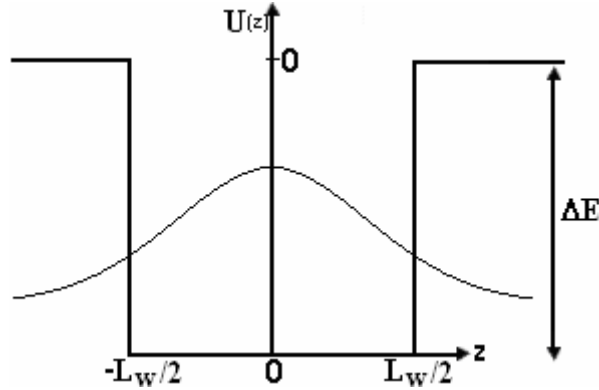


Figura 2.7 – Poço quântico de potencial finito.

A solução da função de onda da equação de Schroedinger independente do tempo para a região dentro do poço tem a mesma forma das funções para o caso do poço infinito

$$\psi(z) = C \cos(K_w z) \quad (2.23)$$

$$\psi(z) = C' \sin(K_w z) \quad (2.24)$$

onde:

$$K_w^2 = \frac{2m_w^*(E_n + \Delta E)}{\hbar^2}. \quad (2.25)$$

A solução para a região $z \geq L_w/2$ pode ser escrita como:

$$\psi(z) = D \exp(-K_b(z - L_w/2)) + E \exp(K_b(z - L_w/2)) \quad (2.26)$$

Analogamente para a região $z \leq -L_w/2$, temos:

$$\psi(z) = F \exp(K_b(z + L_w/2)) + G \exp(-K_b(z + L_w/2)) \quad (2.27)$$

sendo:

$$K_b^2 = \frac{2m_b^* E_n}{\hbar^2}. \quad (2.28)$$

Com a condição da função de onda permanecer finita quando $|z| \rightarrow \infty$, temos $E = G = 0$, resultando em:

$$\psi(z) = D \exp(-K_b(z - L_w/2)), \quad \text{para } z \geq L_w/2 \quad (2.29)$$

$$\psi(z) = F \exp(K_b(z + L_w/2)), \quad \text{para } z \leq -L_w/2. \quad (2.30)$$

Os coeficientes C , C' , D e F podem ser determinados aplicando-se as condições de continuidade para a função de onda $\psi(z)$ e para $(1/m^*)/(\partial\psi/\partial z)$ (necessária para a conservação da corrente de partícula^[2.15]) nas interfaces ($z = \pm L_w/2$).

A condição de continuidade da função de onda impõe que:

$$\psi_b(z_{interface}) = \psi_w(z_{interface}) \quad (2.31)$$

Em seguida, deve-se considerar a continuidade de $(1/m^*)/(\partial\psi/\partial z)$ nas interfaces para que haja a conservação da corrente de partícula.^[2.15] Essa condição de continuidade impõe que:

$$\frac{1}{m_b^*} \frac{d\psi_b(z_{interface})}{dz} = \frac{1}{m_w^*} \frac{d\psi_w(z_{interface})}{dz} \quad (2.32)$$

Aplicando-se estas condições de continuidade para a função de onda $\psi(z)$ e para $(1/m^*)/(\partial\psi/\partial z)$ nas interfaces ($z = \pm L_w/2$) obtêm-se os coeficientes e temos as duas soluções; uma para os estados pares e outra para os estados ímpares, respectivamente:

$$\frac{K_b}{m_b^*} = \frac{K_w}{m_w^*} \tan(K_w L_w / 2) \quad (2.33)$$

$$\frac{K_b}{m_b^*} = -\frac{K_w}{m_w^*} \cotan(K_w L_w / 2) \quad (2.34)$$

As Equações 2.33 e 2.34 são equações transcendentais e não podem ser resolvidas analiticamente. A solução pode ser obtida graficamente e é encontrada em livros textos de mecânica quântica.^[2.15-2.18] O procedimento descrito anteriormente também pode ser aplicado aos buracos leves e buracos pesados na banda de valência.

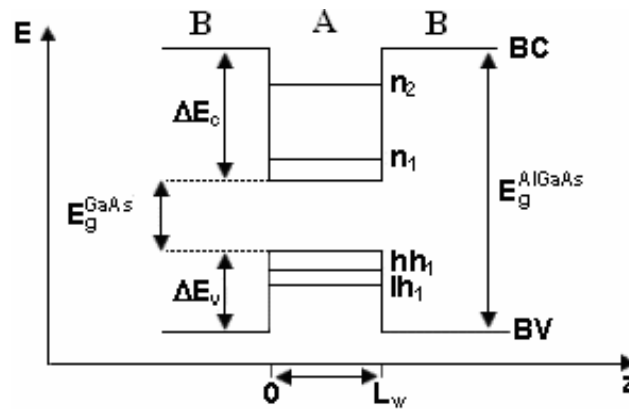


Figura 2.8 – Representação do perfil de potencial do poço quântico; z é a direção de crescimento do poço quântico, L_w representa a largura do poço, n_1 representa o primeiro nível de elétrons, hh_1 representa o primeiro nível de buracos pesados e lh_1 representa o primeiro nível de buracos leves. E_g^{AlGaAs} é o “gap” do material ternário AlGaAs e E_g^{GaAs} é o “gap” do material binário GaAs. ΔE_c e ΔE_v são o “offset” da banda de condução (BC) e o “offset” da banda de valência (BV), respectivamente.

Apesar de bastante simples as soluções obtidas para as autoenergias e autofunções do poço finito permitem uma análise qualitativa de heteroestruturas de poços quânticos reais. A partir das Equações 2.33 e 2.34 calculam-se graficamente os valores das sub-bandas de energia tanto de elétrons como de buracos (pesados e leves), simplesmente introduzindo os respectivos valores de suas massas efetivas.^[2.19]

Na Tabela 2.1 apresentamos os valores das massas efetivas de elétron e buracos (dados pela Equação 2.2) e os valores de E_g^{AlGaAs} , ΔE_g^{AlGaAs} , ΔE_v^{AlGaAs} , ΔE_c^{AlGaAs} (dados pela Equação 2.5a), onde E_g^{AlGaAs} é o valor da energia de “gap” de liga ternária AlGaAs, ΔE_g^{AlGaAs} é o valor da diferença entre a energia de “gap” da liga ternária e a energia de “gap” do GaAs “bulk”, $\Delta E_v^{AlGaAs} = 0.30\Delta E_g^{AlGaAs}$ e $\Delta E_c^{AlGaAs} = 0.70\Delta E_g^{AlGaAs}$.

Tabela 2.1 – Valores utilizados para as massas efetivas de elétron e buracos (dados pela Equação 2.2), E_g^{AlGaAs} , $\Delta E_g^{\text{AlGaAs}}$, $\Delta E_v^{\text{AlGaAs}}$, $\Delta E_c^{\text{AlGaAs}}$ (dados pela Equação 2.5a).

AlGaAs x	m_e^* (m_0)	m_{hh}^* (m_0)	m_{lh}^* (m_0)	E_g^{AlGaAs} (meV)	$\Delta E_g^{\text{AlGaAs}}$ (meV)	$\Delta E_v^{\text{AlGaAs}}$ (meV)	$\Delta E_c^{\text{AlGaAs}}$ (meV)
0.00	0.06700	0.6200	0.08200	1519.400			
0.05	0.07115	0.6270	0.08590	1591.325	71.925	21.5775	50.3475
0.11	0.07613	0.6354	0.09058	1680.077	160.677	48.2031	112.4739
0.14	0.07862	0.6396	0.09292	1725.452	206.052	61.8156	144.2364
0.23	0.08609	0.6522	0.09994	1865.573	346.173	103.8519	242.3211
0.27	0.08941	0.6578	0.10306	1929.773	410.373	123.1119	287.2611
0.35	0.09605	0.6690	0.10930	2061.725	542.325	162.6975	379.6275

Os cálculos das sub-bandas de energia foram realizados de duas formas: *a*) considerando massas do elétron e buraco iguais no poço e na barreira e *b*) considerando massas diferentes, ou seja, a massa do elétron (buraco) dependente da concentração de Al. Os resultados são apresentados no gráfico da Figura 2.9.

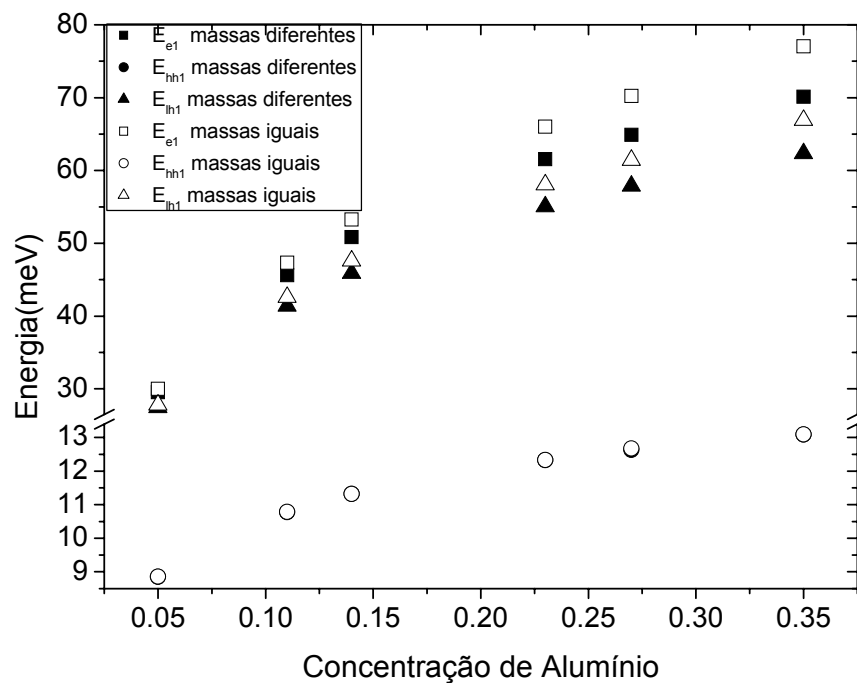


Figura 2.9 – Resultados dos cálculos das sub-bandas de energia de elétrons e buracos, leves e pesados. Os quadrados cheios (vazios) representam as energias das sub-bandas de elétrons com massas diferentes (iguais), os círculos cheios (vazios) representam as energias das sub-bandas de buraco pesado com massas diferentes (iguais) e os triângulos cheios (vazios) representam as energias das sub-bandas de buraco leve com massas diferentes (iguais).

As energias das sub-bandas de elétrons e buracos leves apresentam um comportamento similar com o aumento da concentração de alumínio na barreira. Devido à pequena diferença entre os valores das massas de elétrons e buracos leves (veja a Tabela 2.1) os valores das energias para estas partículas na menor concentração de Al ($x = 0.05$) são quase imperceptíveis. Os valores das energias para os buracos pesados são bem menores. Para pequenas concentrações de Al os efeitos das massas diferentes não se evidenciam. Para concentrações maiores, as diferenças entre as energias dos diferentes tipos de partículas são bem evidentes.

A energia da transição do estado fundamental do elétron (E_{n1}) para o primeiro nível de buraco pesado (E_{hh1}) pode ser calculada facilmente utilizando a equação

$$E_{n1-hh1} = E_{n1} + E_{hh1} + E_g, \quad (2.36)$$

onde E_g é a energia de “gap” para o GaAs. Substituindo a energia E_{hh1} pela E_{lh1} temos a energia de transição para o primeiro nível de buraco leve. Os valores destas energias de transição em função da concentração de alumínio são mostrados no gráfico da Figura 2.10.

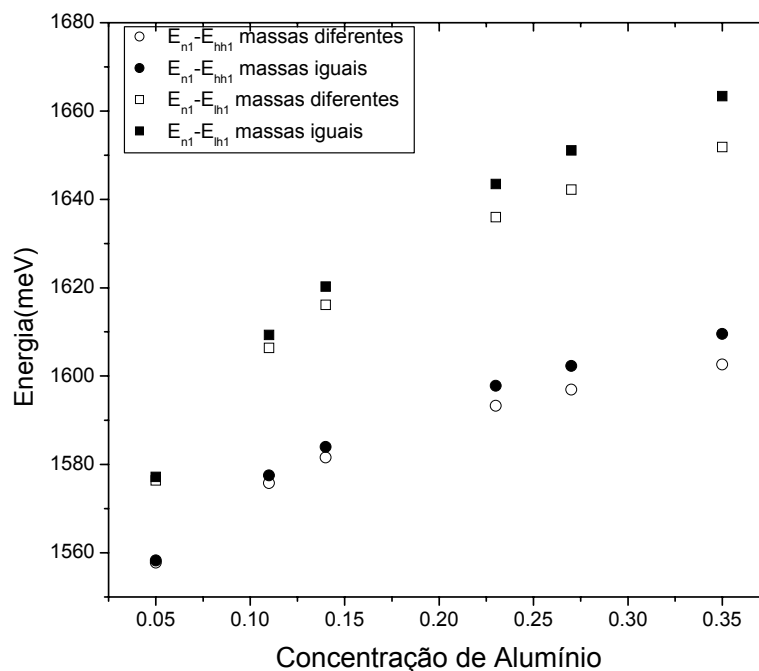


Figura 2.10 – Energia da transição do estado fundamental do elétron para o primeiro nível de buracos pesado e leve em função da concentração de alumínio. O círculo cheio (vazio) representa as recombinções $E_{e1}-E_{hh1}$ com massas iguais (diferentes) e os quadrados cheios (vazio) representam as recombinções $E_{e1}-E_{lh1}$ com massas iguais (diferentes).

As energias de recombinação apresentam o mesmo comportamento em ambos os casos apresentados. Para pequenas concentrações de Al na barreira os resultados dos cálculos realizados com massas iguais e diferentes não apresentam grandes variações e com o aumento da concentração as diferenças entre estes resultados ficam evidentes. As energias de recombinação são maiores para os casos envolvendo massas menores.

Apenas determinadas transições (recombinações) ocorrem em poços quânticos. Na aproximação de poço quântico infinito, devido à ortogonalidade das funções de onda envelope que descrevem a distribuição dos elétrons nos diversos níveis de energia, apenas transições entre estados com mesmo número quântico n são possíveis (regra de seleção $\Delta n = 0$). Para poços quânticos finitos, a regra pode ser quebrada uma vez que as funções de onda envelope não são exatamente ortogonais, o que nos leva à observação de transições com n 's diferentes. Ainda, na maioria dos casos em que se observam transições onde ocorre a quebra da regra de seleção $\Delta n = 0$, a *paridade* das funções de onda envelope é conservada, ou seja: $\Delta n = \text{par}$. Contudo, as transições $\Delta n = 0$ são as mais fortemente observadas em espectros de absorção e excitação.^[2.15]

A função de onda $\psi(z)$ descreve a onda no interior do poço, decaindo exponencialmente dentro da barreira. Isto pode ser observado na Figura 2.7. A penetração da função de onda na barreira tem conseqüências importantes nas propriedades ópticas (variação da energia de recombinação com a concentração de Al, influência da concentração no alargamento de linha da recombinação excitônica, etc.) e de transporte de heteroestruturas (tunelamento).

Pode-se calcular a probabilidade de encontrar uma partícula em qualquer lugar do espaço calculando a integral em todo o espaço do módulo ao quadrado da função de onda da partícula $\psi(z)$.^[2.19] Assim, a probabilidade de encontrar a partícula dentro do poço é dada por:

$$\int_{-L_w/2}^{L_w/2} |\psi_w(z)|^2 dz = P_w \quad (2.37)$$

onde

$$P_w = D^2 \frac{L_w}{2} \left[\frac{1 + \sin(\varepsilon) \cos(\varepsilon)}{\varepsilon} \right] \quad (2.38)$$

e a probabilidade de encontrar a partícula dentro das barreiras é dada por:

$$\int_{-\infty}^{-L_w/2} |\psi_b(z)|^2 dz + \int_{L_w/2}^{\infty} |\psi_b(z)|^2 dz = P_b \quad (2.39)$$

onde

$$P_b = \frac{D^2 L_w \cos^2(\varepsilon)}{4\sqrt{K_b^2 - \varepsilon^2}} + \frac{D^2 L_w \cos^2(\varepsilon)}{4\sqrt{K_b^2 - \varepsilon^2}} \quad (2.40)$$

ε é a energia do nível em que a probabilidade está sendo calculada, L_w é a largura do poço e D é um coeficiente determinado através de normalização dado por:

$$D^2 = \frac{L_w / 2}{1 + \cos(\varepsilon) \left[\frac{\varepsilon \cos(\varepsilon) + \sqrt{K_b^2 - \varepsilon^2} \sin(\varepsilon)}{\varepsilon \sqrt{K_b^2 - \varepsilon^2}} \right]} \quad (2.41)$$

Os resultados dos cálculos das probabilidades em função da concentração de alumínio para $L_w = 60 \text{ \AA}$ (espessuras nominais dos poços analisados neste trabalho), $m_{e,hh,lh}^*(x)$ dadas pela Equação 2.2 e ε estão no gráfico da Figura 2.11.

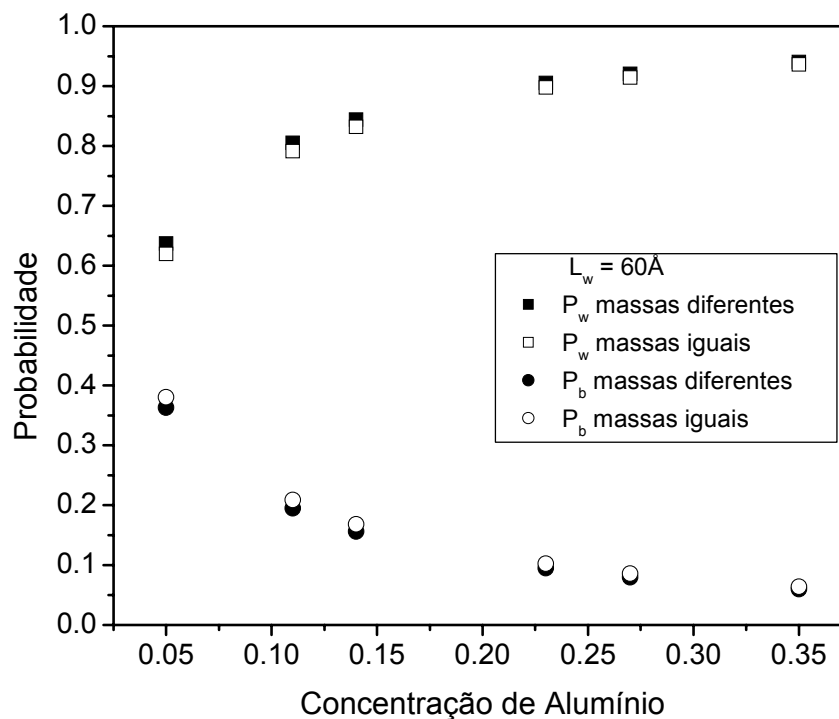


Figura 2.11 – Probabilidade de o elétron estar dentro do poço e fora do poço em função da concentração de alumínio. O quadrado cheio (vazio) representa a probabilidade de encontrar o elétron dentro do poço realizando cálculos com as massas da barreira e do poço diferentes (iguais), o círculo cheio (vazio) representa a probabilidade de encontrar o elétron dentro da barreira realizando cálculos com as massas da barreira e do poço diferentes (iguais).

A probabilidade de o elétron estar dentro (fora) do poço aumenta (diminui) com a concentração de alumínio tanto para o caso em que as massas do poço e das barreiras são iguais quanto para o caso em que elas são diferentes. Por exemplo, para $x = 0.05$ a probabilidade de o elétron estar dentro (fora) é 63.70% (36.30%) e para $x = 0.14$ esta probabilidade aumenta (diminui) para 84.42% (15.58%). O aumento da altura da barreira com o aumento da concentração de Al confina mais fortemente o elétron e os buracos na região do poço, diminuindo a penetração da função de onda nas barreiras.

2.4 FÔNONS: GaAs, AlAs, AlGaAs E POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs

A dependência do “gap” de energia ou das transições excitônicas com a temperatura se deve principalmente à interação elétron-fônon. No Si, Ge e GaAs cálculos teóricos mostraram que a variação da energia devido à interação elétron-fônon se deve à contribuição de fônons acústicos e ópticos, principalmente os fônons acústicos longitudinais (LA) e os ópticos longitudinais (LO).^[2.20,2.21] No GaAs, os fônons acústicos longitudinais (LA) fornecem a contribuição dominante para a variação do “gap” de energia com a temperatura.^[2.21-2.23]

No início da década de 60 as energias e a relação de dispersão de fônons do GaAs eram obtidas por espalhamento de nêutrons.^[2.24] Outras técnicas experimentais tais como espalhamento Raman tem sido empregadas mais recentemente.^[2.8] Existe um grande acúmulo de dados para o GaAs. Para o AlAs entretanto são poucos os resultados experimentais devido a dificuldade de se analisar o AlAs puro em função da tendência deste material oxidar.^[2.25] Vários métodos teóricos foram desenvolvidos ^[2.25,2.26] para o cálculos da relação de dispersão com excelente concordância com os dados experimentais do GaAs. Esta adequação teórica ao GaAs permite inferir com boa precisão os ramos de dispersão do AlAs.^[2.26]

Na Figura 2.12 apresentamos a curva de dispersão dos fônons calculados pela teoria da densidade funcional perturbada e a densidade de estados para o GaAs e o AlAs, respectivamente.^[2.26] A principal diferença entre os dois binários reside na frequência (ou energia) maior para os fônons ópticos do AlAs com relação ao GaAs. Os fônons ópticos têm frequências muito diferentes, formando bandas estreitas em 250 cm^{-1} ($\sim 31 \text{ meV}$) no caso do

GaAs e em 380 cm^{-1} ($\sim 43.3 \text{ meV}$) no caso do AlAs. As curvas de dispersão dos fônons acústicos não diferem muito entre si.

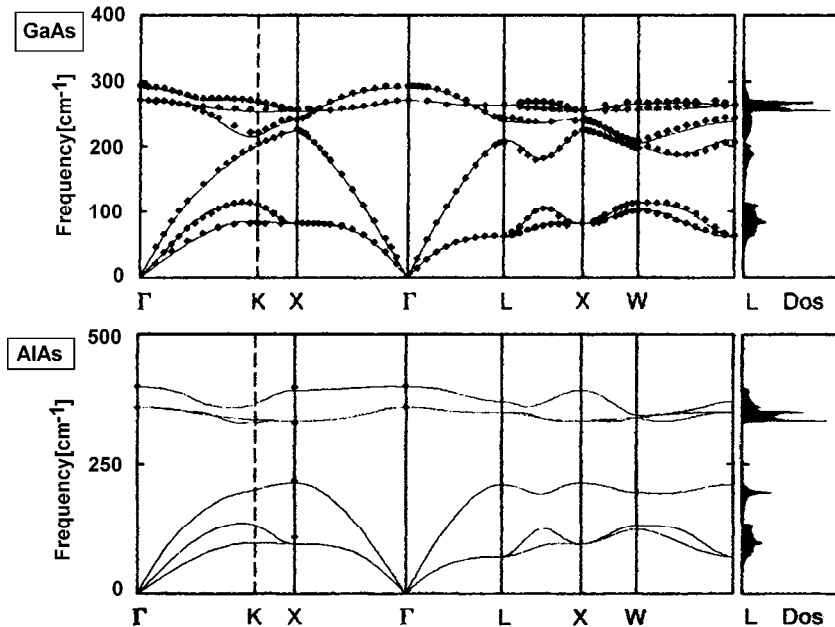


Figura 2.12 – Curvas de dispersão de fônons do GaAs e AlAs calculadas pela teoria da densidade funcional perturbada e densidade de estados, respectivamente.^[2.26] Os círculos cheios são dados experimentais para o GaAs obtidos por espalhamento de nêutrons.^[2.27]

A liga AlGaAs empregada, para formar a barreira em heteroestruturas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs, é uma liga do tipo $A_xB_{1-x}C$. Ligas semicondutoras do tipo $A_xB_{1-x}C$ são geralmente classificadas em duas classes de acordo com o comportamento dos ramos dos fônons ópticos localizados próximos do centro da zona de Brillouin em função da composição da liga, x . Em uma classe de materiais as frequências dos modos dos fônons ópticos (TO e LO) variam continuamente e são aproximadamente lineares com a fração molar x da liga. Em outra classe de materiais os fônons possuem duas bandas de energia próximas das bandas dos binários AC e BC que compõem a liga, que são identificadas como fônons do *tipo-AC* e do *tipo-BC*.^[2.25] Na maioria das ligas III-V os fônons comportam-se de acordo com a segunda classe.

Seja em ligas semicondutoras que apresentam o comportamento dos fônons ópticos da primeira classe, seja nas que apresentam o comportamento da segunda classe, a energia efetiva dos ramos dos fônons ópticos depende da variação da fração molar x . No sistema AlGaAs, os dois modos distintos de vibração dos ramos longitudinal óptico e transversal óptico originam-se dos ramos dos fônons ópticos do *tipo-GaAs* e dos ramos dos fônons ópticos do *tipo-AlAs*, respectivamente. Na Figura 2.13 mostramos estes modos de

vibração para o material AlGaAs. Como se observa, a energia efetiva dos fônons ópticos, neste sistema, aumenta com a concentração de Al. Para $x = 0$ a energia efetiva está localizada entre os ramos dos fônons LO e TO do GaAs. No outro extremo, $x = 1$, a energia efetiva está localizada entre os ramos dos fônons LO e TO do AlAs.

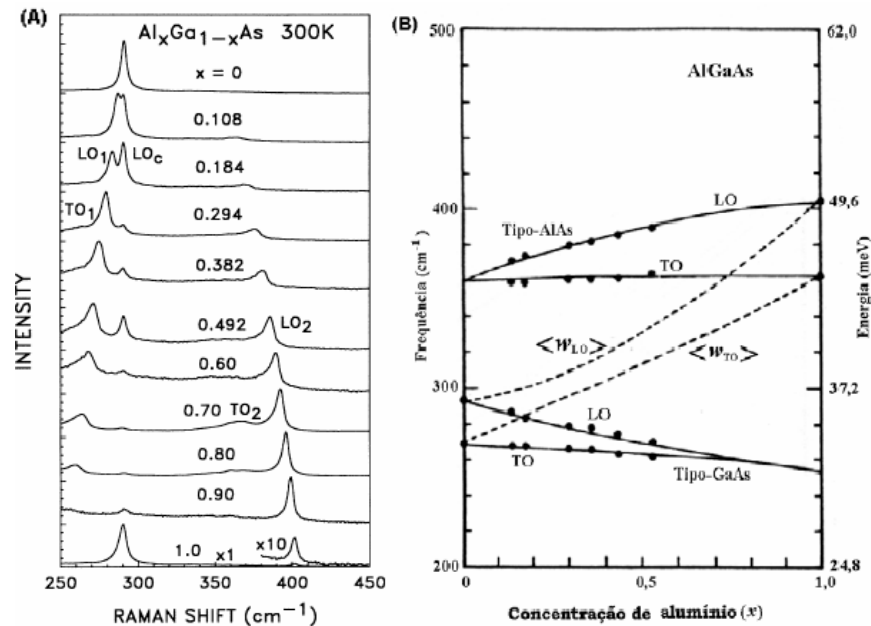


Figura 2.13 – (A) Espectros Raman para diferentes concentrações de Al na liga AlGaAs (obtida da Ref. (2.25)). Esta figura mostra os modos dos fônons LO do *tipo-GaAs* e do *tipo-AlAs* (legendadas por LO₁ e LO₂, respectivamente). Os modos TO do *tipo-GaAs* e do *tipo-AlAs* (representados por TO₁ e TO₂, respectivamente) aparecem fracamente em alguns espectros. O pico que aparece em todos os espectros próximo de 290 cm⁻¹ (35.96 meV)*, identificado por LO_c, representa os fônons LO da camada “cap layer” de GaAs. (B) Energia dos fônons ópticos em função da composição de alumínio na liga AlGaAs. $\langle \omega_{LO} \rangle$ e $\langle \omega_{TO} \rangle$ representam a dependência da energia efetiva dos fônons com a concentração de alumínio.^[2.25]

As energias dos fônons no GaAs e no AlAs e sua dependência com a concentração de Al no Al_xGa_{1-x}As, de acordo com o proposto por S. Adachi^[2.11] são apresentadas na Tabela 2.2.^[2.8] Existe uma carência de medidas diretas destes fônons ópticos para a liga AlGaAs. Então, são propostas interpolações entre a energia dos modos localizados e dos fônons ópticos do limite de zona no GaAs e no AlAs.

* Conversão de cm⁻¹ para meV. (8.064516 cm⁻¹ = 1 meV)

Tabela 2.2 – Energias de fônons no GaAs, AlAs e Al_xGa_{1-x}As. LO, TO, LA e TA são fônons óptico longitudinal, óptico transversal, acústico longitudinal e acústico transversal, respectivamente. O ponto da zona de Brillouin onde a energia é medida é indicado entre parênteses. Todas as energias estão em meV.^[2,8]

	GaAs	AlAs	AlGaAs
LO(Γ) “GaAs-like”	36.2 ^a	31.2 ^b	36.25-6.55x+1.79x ² ^c
LO(Γ) “AlAs-like”	44.1 ^b	50.09 ^a	44.63+8.78x-3.32x ² ^c
LO(X) “GaAs-like”	29.9 ^a	31.2 ^b	29.9+1.3x
LO(X) “AlAs-like”	44.1 ^b	48.0 ^e	44.1+3.9x
LO(L) “GaAs-like”	29.6 ^a	31.2 ^b	29.6+1.6x
LO(L) “AlAs-like”	44.1 ^b	48.4 ^e	44.1+4.3x
TO(Γ) “GaAs-like”	33.23 ^a	32.2 ^b	33.29-0.64x-1.16x ² ^c
TO(Γ) “AlAs-like”	44.1 ^b	44.88 ^a	44.63+0.55x-0.30x ² ^c
TO(X) “GaAs-like”	31.3 ^a	32.1 ^b	31.3
TO(X) “AlAs-like”	44.1 ^b	50.0 ^e	44.1+5.9x
TO(L) “GaAs-like”	32.4 ^a	31.2 ^b	32.4-1.2x
TO(L) “AlAs-like”	44.1 ^b	-	-
LA(X)	28.1 ^f	28.1 ^d	28.1
TA(X)	9.8 ^f	12.8 ^d	9.8+3.0x
LA(L)	25.9 ^f	25.9 ^d	25.9
TA(L)	7.7 ^f	9.9 ^d	7.7+2.2x

^a Ref. [2.28]. ^b Ga(Al) modo localizado no AlAs (GaAs) da Ref. [2.29]. ^c Ref. [2.12]. ^d Ref. [2.30]. ^e Ref. [2.32]. ^f Ref. [2.24].

A intensidade do acoplamento elétron-fônon-LO é geralmente representada pela constante de acoplamento de Fröhlich, definida por:^[2.11,2.34,2.35]

$$\lambda = \frac{e^2 (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)}{2\hbar\omega_{LO}} \sqrt{\frac{2(m_e^* + m_h^*)\omega_{LO}}{\hbar}} \quad (2.42)$$

onde ϵ_∞ e ϵ_s são as constantes dielétricas de alta frequência e estática, respectivamente, m_e^* e m_h^* são as massas efetivas dos elétrons e dos buracos e $\hbar\omega_{LO}$ é a energia do modo LO. Na liga AlGaAs, as massas efetivas dos elétrons e dos buracos (veja Equação 2.2), a energia efetiva do ramo do fônon LO e a relação $(1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)$ aumentam com a concentração de Al, induzindo assim, a um aumento no acoplamento elétron-fônon-LO com x .

A dependência com a composição de Al da constante de Fröhlich λ é aproximadamente dada pelas relações:^[2.11]

$$\lambda(x) = 0.068 + 0.058x \quad (2.43)$$

para elétrons do vale Γ e

$$\lambda(x) = 0.152 + 0.014x \quad (2.44)$$

para elétrons do vale X. Na Figura 2.14 mostramos os resultados deste cálculos.

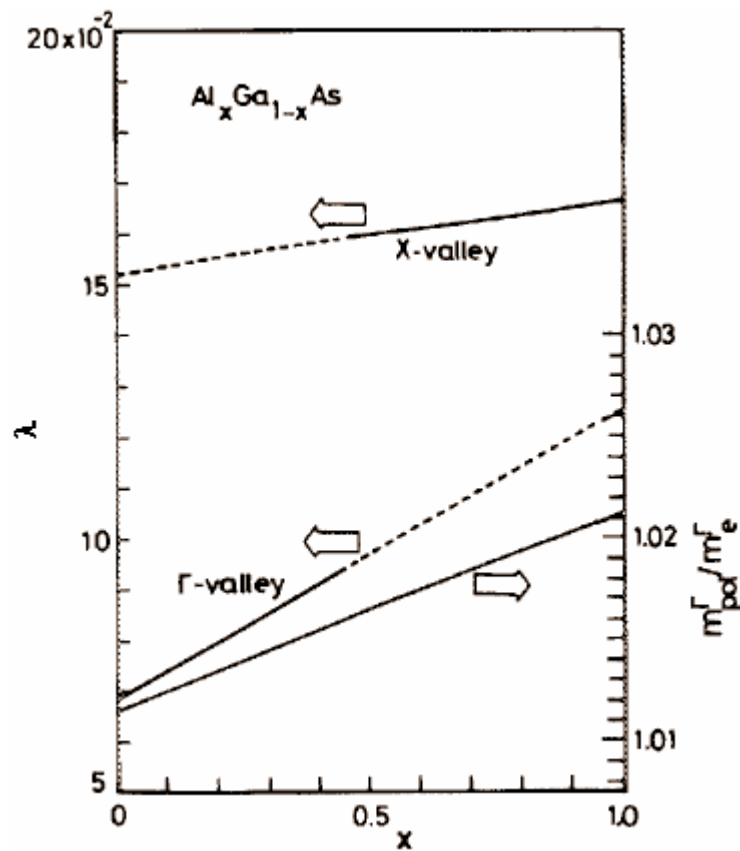


Figura 2.14 – Constante de acoplamento de Fröhlich para os vales Γ e X em função da concentração de Al.^[2.11]

Kash *et al.*,^[2.32] usando medidas de Raman, obtiveram diretamente a intensidade relativa das interações de Fröhlich dos fônons LO para os modos do *tipo-ALAs* e do *tipo-GaAs* do sistema $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e mostraram que a intensidade relativa das interações elétron-fônon-LO aumenta com a composição de alumínio.

Como acontece na liga AlGaAs, poços quânticos de AlGaAs/GaAs também possuem fônons do *tipo-GaAs* e do *tipo-ALAs*. Na Figura 2.15 mostramos espectros Raman obtidos por Sun *et al.*,^[2.36] a $T = 15$ K, para poços quânticos múltiplos de AlGaAs/GaAs com diferentes concentrações de alumínio na barreira.

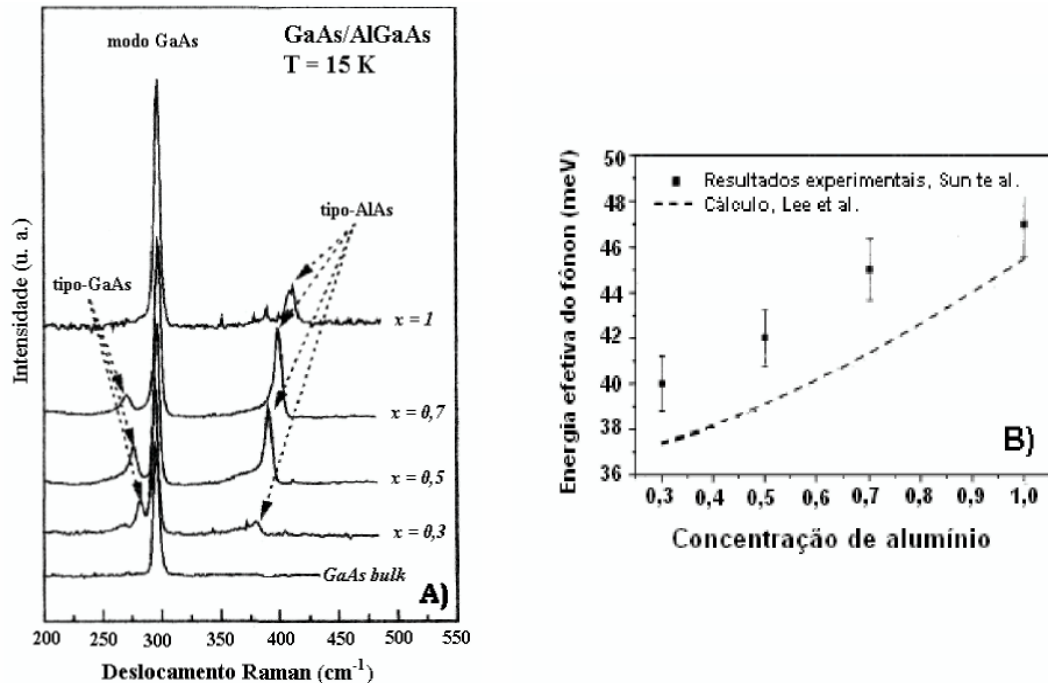


Figura 2.15 – (A): Espectros Raman em função da composição de alumínio em poços quânticos múltiplos de AlGaAs/GaAs e no GaAs “bulk” para $T = 15$ K. O pico em ~ 300 cm^{-1} (37.20 meV) está relacionado com o fônon LO da camada “buffer” do GaAs. Os outros dois picos *tipo-GaAs* e *tipo-AlAs* estão relacionados com a camada da barreira. Esta figura foi obtida da Ref. [2.36]. Aqui $L_w = 50$ Å e $L_b = 120$ Å. (B): Variação da energia efetiva do fônon óptico com a composição de alumínio na barreira. A linha tracejada em B representa os cálculos realizados por Lee *et al.*.^[2.37]

Os fônons LO para o GaAs possuem energia de aproximadamente 37 meV. Para a camada de AlGaAs, os fônons LO mostram duas energias de oscilação: uma do *tipo-GaAs* (cuja energia está abaixo da energia dos fônons LO do GaAs) e outra do *tipo-AlAs* (cuja energia está abaixo da energia dos fônons LO do AlAs). Os quadrados na Figura 2.15B representam a variação da energia efetiva dos fônons ópticos em função da composição de alumínio na barreira. Pode-se verificar assim, de modo semelhante ao obtido para a liga AlGaAs, que a energia efetiva dos fônons LO na heteroestrutura de poços quânticos de AlGaAs/GaAs aumenta com a concentração de Al na barreira.

Ao preparar uma estrutura com diferentes materiais, como os poços quânticos de AlGaAs/GaAs, temos que considerar as diferenças nas relações de dispersão nos fônons ópticos e acústicos, de cada material. Os fônons ópticos próximos do limite da zona de Brillouin têm frequências muito diferentes formando bandas estreitas em 250 cm^{-1} (~ 31 meV) no caso do GaAs e em 380 cm^{-1} (~ 43.3 meV) no caso do AlAs. Portanto, existem modos que se propagam somente no AlAs (GaAs) e não no GaAs (AlAs), fazendo surgir efeitos de confinamento.

Os ramos dos fônons acústicos mostram características diferentes: eles se anulam para $k \rightarrow 0$ ($\hbar\omega_{LA(TA)} = 0$) e sua relação de dispersão é linear com k para $k \sim 0$ ($\hbar\omega_{LA(TA)} \propto k$) em qualquer material na região do vale Γ . Estas peculiaridades geralmente evitam o confinamento dos fônons acústicos e eles se propagam em ambos os materiais na faixa de frequência de zero ao valor máximo da frequência do mais “mole” deles, no nosso caso o GaAs. No caso do sistema GaAs e AlAs os máximos das frequências dos ramos de fônons acústicos tem valores muito próximos em ambos os materiais.

Em resumo os fônons acústicos podem ser representados como fônons misturados (“folded”) com uma relação de dispersão mediada pelos dois materiais “bulk” constituintes da heteroestrutura e os fônons ópticos originam os fônons confinados (“confined”).

A existência de interfaces entre os diferentes materiais em uma heteroestrutura com diferentes propriedades provoca o surgimento de fônons de interface, que decaem fortemente (exponencialmente) na região próxima dos dois materiais. Existem vários modelos teóricos tanto macroscópicos como microscópicos que se propõem a reproduzir os resultados experimentais como o modelo do dielétrico contínuo (DCM) ^[2.37] e o modelo de Huang-Zhu.^[2.39] No modelo de dielétrico contínuo, cada camada da heteroestrutura é substituída por um meio dielétrico caracterizado por uma função dielétrica que depende da frequência de oscilação do meio. Este modelo proporciona dois tipos de modos: os modos confinados e os modos de interface.

Não é nosso objetivo aprofundar esta discussão aqui. O importante é definir quais fônons são determinantes na interação elétron-fônon nos poços quânticos: se os fônons confinados ou se os fônons de interface. Nem sempre as técnicas experimentais permitem dirimir completamente a dúvida quanto a quais tipos de fônons estão participando mais ou menos ativamente nos processos físicos de espalhamentos em poços quânticos. Existe ainda contradição nos resultados teóricos encontrados sobre quais fônons são mais importantes e em que intervalo de espessura de poços quânticos eles são predominantes. Contudo existem evidências de que o acoplamento elétron-fônon para fônons confinados decresce com a largura do poço, enquanto o acoplamento com fônons de interface torna-se mais significativa.^[2.39]

Recentemente, Lee *et al.* ^[2.37] usando o modelo de dielétrico contínuo analisaram o espalhamento proporcionado pelos diversos tipos de fônons em poços quânticos. Destes resultados observa-se que o espalhamento proporcionado por fônons de interface é aproximadamente 3 vezes superior ao devido a fônons confinados em poços quânticos de

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 0.3$ e espessura de 60 \AA . Os resultados da taxa de espalhamento por fônons de interface e da taxa de espalhamento por fônons confinados obtidos por Lee *et al.*^[2.38] são apresentados na Figura 2.16. A contribuição dos fônons de interface ao espalhamento cresce ainda mais para poços com largura menor que 60 \AA .

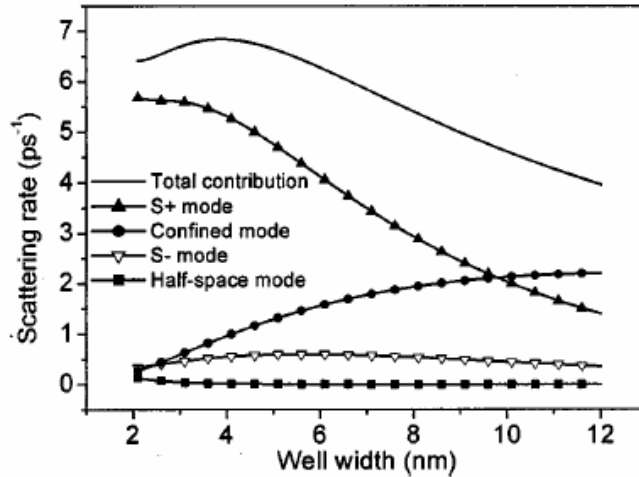


Figura 2.16 – Taxa de espalhamento de diversos tipos de fônons existentes em poços quânticos: fônons ópticos interface com simetria S^+ e S^- , fônons ópticos confinados, fônons ópticos do modo *half-space*, e a contribuição da taxa total de todos os tipos de modos com a largura do poço. A composição de Al é 0.3, a temperatura de rede é 15 K.^[2.37]

Uma possível explicação para isto está no fato de que para poços estreitos a função de onda penetra fortemente na barreira. Isto pode explicar porque os fônons de interface são determinantes nos processos de interação elétron-fônon. Os fônons de interface podem ser classificados como fônons dos modos TO e LO. Os modos TO não contribuem para interação de Frölich, que domina o espalhamento eletrônico pelos fônons ópticos polares.^[2.41]

A intensidade do acoplamento elétron-fônon-LO em poços quânticos é representada pela constante de acoplamento definida por:^[2.35,2.42,2.43]

$$\lambda = \frac{2\pi e^2 (1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_s) \sqrt{(m_e^* + m_h^*) \hbar \omega_{LO} / 2\hbar^2}}{q^2 \Omega} \quad (2.45)$$

onde ε_∞ e ε_s são as constantes dielétricas de alta frequência e estática, respectivamente, m_e^* e m_h^* são as massas efetivas dos elétrons e dos buracos e $\hbar \omega_{LO}$ é a energia do modo LO, $\Omega = L_x L_y L_z$ é a dimensão nas direções x, y e z, e \mathbf{q} é o vetor de onda do fônon ($\mathbf{q} = (q_x, q_y, n\pi/L_z)$; onde n é um número inteiro). As massas efetivas dos elétrons e dos buracos na liga AlGaAs assim como a energia efetiva do ramo do fônon LO e a relação $(1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_s)$ aumentam com a

concentração de Al, induzindo assim, a um aumento na intensidade do acoplamento elétron-fônon-LO com x nos poços quânticos de AlGaAs/GaAs.

Resultados experimentais ^[2.36] e teóricos ^[2.37] mostraram que a energia efetiva dos fônons em poços quânticos depende da concentração de Al na barreira. Resultados teóricos obtidos por Lee *et al.* mostraram que a dependência com a concentração de Al é mais forte em modos de interface com simetria S^+ .^[2.37] Estes resultados estão representados na Figura 2.15B pelas linhas tracejadas.

S. Baroni *et al.* ^[2.45] mostraram que a introdução de Al para formar o AlGaAs tem um efeito pequeno sobre os ramos acústicos que são muito semelhantes no GaAs e no AlAs.^[2.45] As relações de dispersão na região entre os dois extremos $0 < x < 1$, na liga $Al_xGa_{1-x}As$, devem por tanto ser também muito semelhantes. As energias destes fônons como se verifica na Tabela 2.2 não depende de x ou varia muito pouco com a concentração entre os binários GaAs e AlAs.

2.5 EFEITOS DO CONFINAMENTO SOBRE A VARIAÇÃO DA LARGURA DE LINHA A MEIA ALTURA (FWHM) E DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO EXCITÔNICA (E_g) COM A TEMPERATURA

2.5.1 Efeito do confinamento sobre a FWHM(T)

Geralmente a FWHM(T) ou HWHM(T) é dada por:^[2.46]

$$\Gamma(T) = \Gamma_0 + aT + bN_{LO}(T). \quad (2.46)$$

O primeiro termo (Γ_0) é independente da temperatura e surge do espalhamento associado a impurezas e imperfeições (espalhamento não homogêneo). O segundo termo (aT) surge da interação de elétrons com fônons acústicos e o coeficiente a fornece a intensidade das interações de elétrons com fônons acústicos. O último termo (bN_{LO}) é proporcional à função de ocupação de Bose-Einstein $N_{LO}(q,T) = [\exp[\hbar\omega(q)/k_B T] - 1]^{-1}$ e surge da interação de elétrons com fônons ópticos. O coeficiente b fornece a intensidade das interações de elétrons com fônons ópticos longitudinais (LO). A comparação da Equação 2.46

com resultados experimentais da dependência de $\Gamma(T)$ com a temperatura pode ser usada para determinar os valores dos coeficientes a e b .

A interação elétron-fônon acústico, portanto é dada pelo parâmetro a em unidade de ($\mu\text{eV/K}$). A descrição no intervalo de 10 – 150 K da HWHM pode ser dada por $\Gamma(T) = \Gamma_0 + aT$. Resultados experimentais da HWHM de poços quânticos com largura menor que 200 Å usando várias técnicas mostram que os valores da intensidade da interação de elétrons com fônons acústicos estão na maior parte na faixa de 1 – 3 $\mu\text{eV/K}$ para poços.^[2.45,2.47-2.50] Trabalhos experimentais sobre o GaAs “bulk”,^[2.48,2.51] por outro lado, resultam em valores na faixa de 8 – 12 $\mu\text{eV/K}$. Estes resultados experimentais da largura de linha do GaAs “bulk” e poços quânticos são mostrados na Figura 2.17.

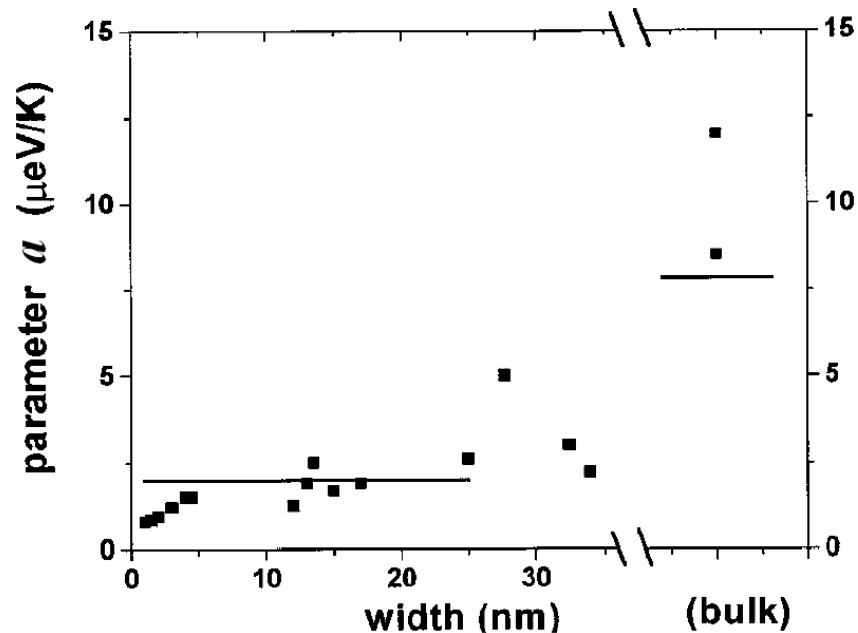


Figura 2.17 – Resultados experimentais e teórico da contribuição dos fônons acústicos para a HWHM em poços quânticos de GaAs e GaAs “bulk”. Quadrados são resultados experimentais do parâmetro a da meia largura de linha a meia altura. Os dados foram tirados das Refs. [2.44,2.47-2.52]. A linha horizontal da direita é resultado de cálculo teórico^[2.52] para o GaAs “bulk” e a linha horizontal da esquerda é resultado de cálculo teórico^[2.52] para poços quânticos de GaAs.^[2.52]

Embora exista uma considerável variação nestes dados, está claro que a interação elétron-fônon acústico é aproximadamente cinco vezes menor para os poços quânticos de GaAs em relação ao GaAs “bulk”.

A contribuição da interação éxciton-fônon acústico pode ser descrita em materiais “bulk” e heteroestruturas como a soma de duas contribuições: uma associada ao

potencial deformação (DP) e outra ao potencial piezoelétrico (PE) de acordo com a expressão:^[2.46]

$$\Gamma = \Gamma(0) + \Gamma^{DP} + \Gamma^{PE} \equiv \Gamma(0) + aT \quad (2.47)$$

onde $\Gamma(0)$ é a parte independente da temperatura e $a = \Gamma^{DP}/T + \Gamma^{PE}/T$.

Cada um destes termos Γ^{DP}/T e Γ^{PE}/T está relacionado à banda de condução (BC) e à banda de valência (BV), conforme Equações 2 e 3 da Ref. [2.46]. O tamanho do raio excitônico e a anisotropia no espaço recíproco das respectivas bandas vão ser os fatores fundamentais para avaliar a contribuição de cada um. Para materiais ou estruturas isotrópicas, a contribuição da interação através de DP é grande e a contribuição através de PE é nula. Para materiais ou estruturas anisotrópicas a contribuição da interação via PE pode ser significativa.^[2.46] A relação de dispersão para o éxciton de buraco pesado no GaAs “bulk” é fortemente anisotrópica fazendo com que a contribuição de PE corresponda a aproximadamente 85% e a DP seja somente de 15%.

Analisando o espalhamento éxciton-fônon acústico em poços quânticos verifica-se que a simetria é reduzida e a degenerescência da banda de valência no centro da zona de Brillouin é parcialmente levantada reduzindo a anisotropia. Assim no poço quântico a contribuição PE pode ser desprezada em comparação com a contribuição DP. Deste modo o confinamento quântico e o surgimento de níveis discretos de energia induzem a um decréscimo da interação éxciton-fônon acústico.

2.5.2 Efeito do Confinamento sobre a $E_g(T)$

Os efeitos do confinamento sobre a variação da recombinação excitônica ou “gap” de energia com a temperatura poderão ser melhor discutidos após a introdução dos diferentes modelos de ajuste que serão vistos no Capítulo 3. De toda forma é importante ressaltar que em alguns trabalhos, têm-se relatado que os níveis de energia dos poços quânticos decrescem com aumento da temperatura e que esta variação térmica comporta-se de maneira semelhante à dependência com a temperatura do “gap” do material que constitui o poço. Este comportamento foi observado, por exemplo, para poços quânticos de AlGaAs/GaAs com rede casada.^[2.53-2.61] Porém, outros autores relatam que a presença das barreiras e das interfaces modifica o comportamento da energia do “gap” em poços

quânticos.^[2.62,2.63] Lourenço *et al.* ^[2.64,2.65] estudaram o comportamento das transições excitônicas em função da temperatura em poços quânticos de AlGaAs/GaAs com diferentes concentrações de alumínio no material da barreira e verificaram uma forte influência do material da barreira sobre o comportamento térmico das transições excitônicas. Outros materiais também mostraram o mesmo comportamento.^[2.66,2.67] Os parâmetros dos vários modelos de ajuste, a serem tratados no Capítulo 3, variam com a concentração de Al.

3 MODELOS TEÓRICOS

Neste capítulo vamos descrever os principais modelos teóricos para ajustar a variação de “gap” de energia ou da recombinação excitônica com a temperatura.

3.1 MODELOS QUE DESCREVEM A VARIÇÃO DO “GAP” DE ENERGIA COM A TEMPERATURA

3.1.1 Introdução

A dependência do “gap” de energia ou das transições excitônicas com a temperatura – $E_g(T)$ – é uma característica muito importante de qualquer material semicondutor.^[3.1-3.4] Os primeiros resultados publicados sobre a variação do “gap” de energia com a temperatura datam de 1930.^[3.5] Naquele trabalho inicial supôs-se, com base nos poucos dados experimentais disponíveis então, que as energias de “gap” (E_g) eram linearmente dependentes da temperatura.^[3.6,3.7,3.8] O acúmulo de dados experimentais desde a invenção do transistor mostrou que dE_g/dT anula-se quando $T \rightarrow 0$.^[3.8]

A baixíssimas temperaturas ($T < 10$ K) o comportamento assintótico para $T \rightarrow 0$ é do tipo T^4 . Pode-se verificar isto sem o uso de qualquer equação empregando o modelo de Debye em que o comportamento assintótico previsto (e demonstrado experimentalmente) do calor específico (a derivada da energia em relação à T) é $\sim T^3$.^[3.8,3.9] Com o aumento da temperatura o comportamento de $E_g(T)$ ainda pode ser representado por uma expressão do tipo T^p , mas com p variando entre 2 e 3.33.^[3.10] A altas temperaturas o comportamento da energia do “gap” é linear com a temperatura.

A variação do “gap” de energia em função da temperatura ocorre devido à contribuição de dois mecanismos distintos: a interação elétron-fônon (IEF) e a expansão térmica da rede (ETR).^[3.11-3.14] Esta dependência pode ser representada pela expressão geral:

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial E_g}{\partial T} \right)_{IEF} + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T} \right)_{ETR} \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo no segundo membro representa a variação do “gap” com a temperatura a volume constante (contribuição da interação elétron-fônon) e o segundo termo representa a variação do “gap” induzida pela variação do volume (contribuição da expansão térmica).

De modo geral, a contribuição da expansão térmica para a variação de $E_g(T)$ é pequena comparativamente à contribuição da interação elétron-fônon. Embora alguns trabalhos com GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, para $x = 0.06$ e $x = 0.15$, tenham registrado contribuições de 40 a 45% da dilatação térmica para a redução do “gap” de energia com a temperatura,^[3.15,3.16] acredita-se que a contribuição da dilatação térmica, a temperatura ambiente, é da ordem de 2% a 20% dependendo do material semiconductor.^[3.14,3.17] No caso do GaAs, a contribuição da expansão térmica da rede para a redução total da energia de “gap” a temperatura ambiente foi estimada em 21%.^[3.18] Assim, devido à “pequena” contribuição da dilatação térmica para a variação total do “gap” de energia com a temperatura, diversos modelos foram propostos considerando somente o mecanismo da interação elétron-fônon como uma primeira aproximação para o entendimento do comportamento de $E_g(T)$.^[3.16,3.19-3.21]

O mecanismo de interação elétron-fônon pode ser dividido em duas diferentes contribuições: o efeito da interação elétron-fônon de segunda ordem (termos de Debye-Waller)^[3.13,3.22] e o efeito da interação elétron-fônon de primeira ordem (os termos de Fan).^[3.7] Ambos são obtidos através do cálculo de perturbação da auto-energia do elétron quando os átomos do cristal sofrem um deslocamento da posição de equilíbrio.

A correção de Debye-Waller é um efeito de segunda ordem na interação elétron-fônon (envolve hamiltoniana de segunda ordem) tomado em primeira ordem na teoria de perturbação.^[3.7] Já o termo de Fan (“auto-energia”) é um efeito de primeira ordem na interação elétron-fônon tomado em segunda ordem na teoria de perturbação.^[3.23] Considerando ainda a expansão térmica da rede, podemos descrever a variação da energia da banda com a temperatura de acordo com a expressão:^[3.24]

$$E_{kn}(T) = \varepsilon_{kn} + \Delta_{kn}^{DW} + \Delta_{kn}^{Fan} + \Delta_{kn}^{Th} \quad (3.2)$$

onde ε_{kn} é a energia de enésima banda não perturbada, Δ_{kn}^{DW} é o deslocamento da energia de banda induzida pelo termo de Debye-Waller (DW), Δ_{kn}^{Th} é o deslocamento da energia de banda induzida pelo termo de expansão térmica da rede e Δ_{kn}^{Fan} é a variação da energia devido ao termo de Fan que pode ser dividido em duas partes, de acordo com:

$$\Delta_{kn}^{Fan} = \Delta_{kn}^{SE} + i\Gamma_{kn} \quad (3.3)$$

onde a parte real surge do deslocamento dos estados de banda e a parte imaginária surge do alargamento do tempo de vida destes estados.

Cálculos de $\Delta_{kn}^{DW} + \Delta_{kn}^{SE} + i\Gamma_{kn}$ por vários métodos considerando a interação elétron-fônon de primeira ordem não levam, entretanto à expressões que ajustem os dados experimentais da variação da energia de “gap” (ou recombinações excitônicas) e ou o alargamento de linha com a temperatura.^[3.24]

Nesta seção faremos uma síntese de quatro modelos que descrevem a variação do “gap” de energia com a temperatura, sem considerar os efeitos da dilatação térmica, em materiais semicondutores: os modelos de Varshni, Viña e dois modelos de Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*).

3.1.2 Modelo de Varshni

Na década de 60, Varshni propôs a primeira expressão analítica para ajustar o “gap” de energia com a temperatura para os materiais semicondutores.^[3.25] A expressão empírica proposta por Varshni é:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha_{Var} \frac{T^2}{\beta + T} \quad (3.4)$$

onde $E_g(0)$ é o “gap” de energia à temperatura de 0 K, α_{Var} e β são coeficientes puramente empíricos a serem obtidos através do ajuste dos dados experimentais. O coeficiente α_{Var} está relacionado com o $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{dE}{dT}$ e β geralmente é considerado comparável à temperatura de Debye Θ_D .

O comportamento da equação de Varshni para baixas e altas temperaturas (definidas em relação a β) pode ser estimado por:

$$E_g(T) \rightarrow E_g(0) - \frac{\alpha_{Var}}{\beta} T^2 \quad \text{para } T \ll \beta \quad (3.5)$$

$$E_g(T) \rightarrow E_g(0) - \alpha_{Var}(T - \beta) \quad \text{para } T \gg \beta \quad (3.6)$$

Como pode ser observado através das equações acima, a expressão de Varshni apresenta uma dependência quadrática para a região de baixas temperaturas e um comportamento linear para altas temperaturas.

O modelo de Varshni apresenta problemas, pois não fornece ajustes de boa qualidade, especialmente na região de baixas temperaturas onde o modelo apresenta um comportamento assintótico tipo T^2 . (Varshni alegou erroneamente que este comportamento era resultado das teorias propostas por T. Muto^[3.6] e H. Y. Fan.^[3.7]) Verificou-se que os valores numéricos de α_{Var} e β obtidos a partir dos ajustes variam significativamente de artigo para artigo. Para o GaAs, por exemplo observam-se faixas com valores variando entre $0.54 \text{ meV/K} \leq \alpha_{Var} \leq 1.06 \text{ meV/K}$ e $204 \text{ K} \leq \beta \leq 671 \text{ K}$.^[3.26] Recentemente verificou-se em binários, ternários e heteroestruturas que o modelo de Varshni era inadequado^[3.26-3.31] proporcionando sistematicamente resultados superiores as curvas experimentais na região de baixas temperaturas. Segundo Pässler, o modelo de Varshni é incapaz de fornecer interpretações físicas adequadas para o comportamento da energia de recombinação excitônica com a temperatura.^[3.31]

Apesar da grande divergência entre os parâmetros da equação de Varshni, este modelo continuou sendo utilizado durante as últimas décadas e continua atualmente, em virtude, sobretudo, de sua simplicidade.

Visando obter expressões analíticas que não fossem totalmente empíricas e que pudessem resultar em melhores ajustes para os dados experimentais, outros modelos foram propostos.

3.1.3 Modelo de Viña

Em 1984 Viña *et al.*^[3.32] propuseram um modelo semi-empírico para descrever a variação do “gap” de energia com a temperatura, baseado na distribuição estatística de Bose-Einstein. A expressão proposta por Viña é dada por:

$$E_g(T) = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \quad (3.7)$$

onde $E_g(T = 0) = E_B - a_B$ é o “gap” de energia à $T = 0 \text{ K}$, a_B descreve a intensidade da interação elétron-fônon óptico e $\Theta_B \equiv \hbar\omega/k_B$ representa a energia média dos fônons na escala de temperatura.^[3.32] O modelo de Viña foi aplicado para o ajuste da variação do “gap” de energia com a temperatura em elementos, como Si e Ge, em binários, como o GaAs^[3.33] e InP,^[3.34] ternários, como o AlGaAs^[3.27], quaternários, como o AlGaAsSb^[3.28] e

heteroestruturas, tais como super-redes de InGaAs/InAlAs,^[3.29] poços quânticos,^[3.30] poços quânticos com “spike”,^[3.30] etc.

A aproximação do modelo de Viña para baixas temperaturas (definidas em relação à Θ_B) é dada por:

$$E_g(T) \rightarrow E_B - a_B(1 + 2 \exp(-\Theta_B/T)) = E_g(0) - 2a_B \exp(-\Theta_B/T) \text{ para } T \ll \Theta_B \quad (3.8)$$

Para altas temperaturas, fazendo $2X = \Theta_B/T$ na Equação 3.7 e estabelecendo a condição $2X \ll 1$, ou seja, $T \gg \Theta_B$, pode-se desenvolver $\exp(2X) = 1 + 2X + 2X^2 + 4X^3/3 + \dots$ (série de Taylor). Considerando até o termo linear na expansão, têm-se:

$$E_g(T) \rightarrow E_B - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} T = E_g(0) - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} (T - \Theta_B/2) \quad \text{para } T \gg \Theta_B \quad (3.9)$$

Assim, o modelo de Viña também mostra um comportamento *linear* para altas temperaturas, similar ao modelo de Varshni. Comparando a Equação 3.9 com a Equação 3.6 nota-se que $\alpha_{Var} \equiv 2a_B/\Theta_B$ e $\beta \equiv \Theta_B/2$.

Considerando termos até segunda ordem na expansão de $\exp(2X)$ é fácil verificar que:

$$\left[\frac{2a_B}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \cong \frac{(2a_B/\Theta_B)T^2}{T + \Theta_B/2} \quad (3.10)$$

Fazendo-se, novamente, $\alpha_{Var} = 2a_B/\Theta_B$ e $\beta = \Theta_B/2$ obtém-se a equação de Varshni, ou seja, a equação de Varshni é uma aproximação de segunda ordem da parte dinâmica da expressão de Viña, que é associada à interação elétron-fônon, e é válida somente para a condição $\Theta_B/T \ll 1$.

O modelo proposto por Viña também apresenta problemas: a baixas temperaturas o ajuste exibe uma curvatura muito suave, desaparecendo por completo para temperaturas inferiores a aproximadamente 50 K. Este comportamento tipo platô do modelo de Viña para baixas temperaturas surge porque o modelo não considera os fônons acústicos, que dominam a interação a baixas temperaturas. Por exemplo, no caso de semicondutores como o Ge, GaAs, InAs e AlAs a temperatura característica dos fônons Θ_B está abaixo de 300 K, portanto (considerando-se a condição $T \gg \Theta_B$) a equação de Viña fornece bons ajustes para estes materiais em temperaturas acima da temperatura ambiente.^[3.33,3.34]

3.1.4 Modelos de Pässler

Em estudos realizados por Pässler,^[3.16] utilizando os resultados publicados por Grilli da dependência com a temperatura do “gap” de energia do GaAs,^[3.35] evidenciou-se que a tendência quadrática (T^2), relativamente forte no modelo de Varshni e o desaparecimento da dependência com T no modelo de Viña para a região de baixas temperaturas estão representando certos limites do comportamento físico real. Pässler^[3.21] argumenta que a dependência da variação do “gap” de energia com a temperatura em materiais semicondutores, para a região de baixas temperaturas, deve ser proporcional a uma lei de potência, do tipo $E_g(T) \propto T^p$, onde o expoente p difere do valor convencional $p = 2$ inicialmente proposto por Varshni.^[3.25] Além disso, Pässler^[3.16] demonstrou que apenas três parâmetros (por exemplo $E_g(T=0)$, α_{Var} e β do modelo de Varshni) são insuficientes para uma descrição adequada da curva experimental de $E_g(T)$. Em 1996, Pässler desenvolveu um novo modelo analítico (modelo p), com quatro parâmetros, para descrever o efeito da variação do “gap” de energia com a temperatura para os materiais semicondutores^[3.36] obtendo a expressão:

$$E(T) = E_p - \frac{\alpha_p \Theta_p}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta_p} \right)^p} - 1 \right] \quad (3.11)$$

Nesta expressão $\alpha_p \equiv S(T) = - (dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$ é um parâmetro a ser ajustado e está relacionado à entropia do “gap” de energia para regiões de altas temperaturas (mesmo parâmetro que aparece na Equação 3.4 de Varshni), $\Theta_p \equiv \hbar\omega/k_B$ é o parâmetro de temperatura característica representando a energia efetiva dos fônons $\hbar\omega$ na escala de temperatura^[3.24,3.32,3.36] e o expoente p está associado à função espectral ou distribuição de freqüências $f(\omega) \propto \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^\nu$, através da relação $p = \nu + 1$. Vale ressaltar que Θ_B da expressão de Viña e Θ_p da expressão de Pässler representam o mesmo parâmetro.

Uma estimativa do grau de dispersão dos fônons pode ser obtida pela razão entre a raiz quadrada da distância quadrática média e o centro de gravidade $\langle \varepsilon \rangle$:

$$\Delta \equiv \frac{\sqrt{\langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2}}{\langle \varepsilon \rangle} \quad (3.12)$$

onde $\langle \varepsilon \rangle = \langle \hbar\omega \rangle$.

A curvatura da parte não linear de $E_g(T)$ representa uma impressão digital do semicondutor e pode ser relacionada como o centro de gravidade e a largura efetiva (distância quadrática média) dos modos dos fônons que contribuem de maneira substancial para a variação de $E_g(T)$.

Para o modelo de Pässler *tipo-p* o grau de dispersão dos fônons pode ser dado por: $\Delta p \equiv 1/\sqrt{p^2 - 1}$. Desta equação pode-se distinguir os seguintes regimes de dispersão:

a – $\Delta p > 0.577$ corresponde ao regime de grande dispersão. Este é o caso onde a contribuição dos fônons com baixa energia (TA e LA – de longo comprimento de onda) é comparável com a contribuição dos fônons de alta energia (LO, TO e LA - de curto comprimento de onda).

b – $\Delta p < 0.30$ corresponde ao regime de baixa dispersão. Este é o caso onde a contribuição dos fônons de baixa energia é muito pequena em comparação com os fônons de alta energia.

c – $0.30 < \Delta p < 0.577$ corresponde ao regime de dispersão intermediária. A maioria dos materiais semicondutores está nesta faixa.

O modelo de Pässler *tipo-p* tem sido aplicado com sucesso em uma grande variedade de materiais semicondutores elementares como o Si,^[3.37] em compostos binários como o CdS^[3.36] e GaAs,^[3.16] ternários, como o AlGaAs^[3.27], quaternários, como o AlGaAsSb^[3.28] e heteroestruturas, tais como super-redes de InGaAs/InAlAs,^[3.29] poços quânticos,^[3.30] poços quânticos com “spike”,^[3.30] etc, fornecendo melhores ajustes para os conjuntos de dados experimentais de $E_g(T)$, com ajuste de mínimo-quadrado (S^2) significativamente menor do que os associados aos modelos empírico de Varshni e semi-empírico de Viña.

Contudo, a discussão sobre o melhor modelo para ajustar a energia de “gap” ou transição excitônica com a temperatura ainda está aberta. A Equação 3.11, apesar de ter fornecido excelentes resultados em relação aos modelos de Viña e principalmente de Varshni, e ter uma estrutura analítica relativamente simples, não consegue separar as contribuições dos fônons dos diferentes ramos para a variação do “gap” com a temperatura e não proporciona bons ajustes para os parâmetros Θ_p e p , principalmente para $p > 3$. Este comportamento ($p > 3$) surge em semicondutores de “gap” grande como SiC e GaN,^[3.16] poços quânticos estreitos ($L_w < 30 \text{ \AA}$) e em estruturas de super-redes de período curto. Em função disso, em 1998, Pässler propôs uma nova função de ajuste para ajustar os casos onde $p > 3$, que fosse capaz de estimar

a contribuição dos fônons dos diferentes ramos (acústicos e ópticos) conhecida como modelo de Pässler *tipo- ρ* , que mostramos a seguir:^[3.21,3.38]

$$E(T) = E_\rho - \frac{\alpha_\rho \Theta_\rho}{2} \left[\frac{\rho}{2} \left(\sqrt[4]{1 + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^2 + \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^4} - 1 \right) + (1 - \rho) \left(\coth \left(\frac{\Theta_\rho}{2T} \right) - 1 \right) \right] \quad (3.13)$$

onde o parâmetro $0 \leq \rho \leq 1$ controla os pesos relativos da contribuição dos fônons ópticos e acústicos. O parâmetro $\Theta_\rho \equiv \hbar \omega_0 / k_B$ representa a energia de corte na escala de temperatura.

No limite de $\rho \rightarrow 1$ obtêm-se $\Theta \rightarrow \Theta_\rho/2$ ($\Theta = \langle \varepsilon \rangle / k_B$ é a temperatura efetiva dos fônons) representando a maior contribuição dos fônons acústicos. No limite $\rho \rightarrow 0$ obtêm-se $\Theta \rightarrow \Theta_\rho$ representando uma maior contribuição dos fônons ópticos. A função espectral é dada por:

$$f(\omega) = \frac{\alpha_\rho}{k_B} \left[\rho \frac{\omega}{\omega_0} + (1 - \rho) \omega_0 \delta(\omega - \omega_0) \right] \quad \text{para } 0 \leq \omega \leq \omega_0. \quad \text{O parâmetro análogo à}$$

temperatura efetiva dos fônons Θ_p (Equação 3.11) é dado por $\Theta_r = \Theta_\rho(1 - 0.5\rho)$. A relação de dispersão para este modelo é definida por: $\Delta\rho = \frac{1}{(2 - \rho)} \sqrt{\frac{\rho}{3}(4 - 3\rho)}$.

Neste trabalho os modelos teóricos descritos acima (exceto o de Varshni) serão empregados, com objetivo de verificar qual a influência do material da barreira no comportamento das transições quantizadas nestas heteroestruturas, em função da concentração de alumínio.

3.1.5 Comparação entre os modelos

Na Figura 3.1, a seguir, são mostrados os dados redigitalizados da variação do “gap” de energia com a temperatura para o GaAs publicado inicialmente por Grilli *et al.*,^[3.35] e os ajustes obtidos através dos modelos de Varshni, Viña e os dois propostos por Pässler.

Observa-se que as curvas de Varshni e de Viña para região de temperaturas superiores a 100 K são quase indistinguíveis. Contudo, para $T < 80$ K existe uma diferença clara entre essas curvas (vide inserção na Fig. 3.1). Nesta região, especialmente para $T < 40$ K, o modelo proposto por Varshni exibe uma curvatura muito forte, superestimando o “gap” para $T = 0$ K. Já a curva proposta por Viña exibe, nessa região, uma curvatura muito mais suave,

desaparecendo por completo para $T < 20$ K e subestimando o “gap” para $T = 0$ K. Neste comportamento tipo platô, o modelo de Viña para baixas temperaturas evidencia a ausência de qualquer dependência do tipo potência, isto é, do tipo T^p , para $p = 1,2,3,\dots$, etc. (vide Equação 3.7). Essa diferença entre ambos os modelos é observada na Figura 3.1, onde fica ilustrado que um ajuste adequado dos dados experimentais do “gap” de energia para o GaAs na região de baixa temperatura não pode ser realizado através dos modelos de Varshni e Viña. Na região de alta temperatura estes modelos se comportam linearmente. Nota-se, ainda, que o modelo proposto por Pässler é o que melhor descreve os pontos experimentais.

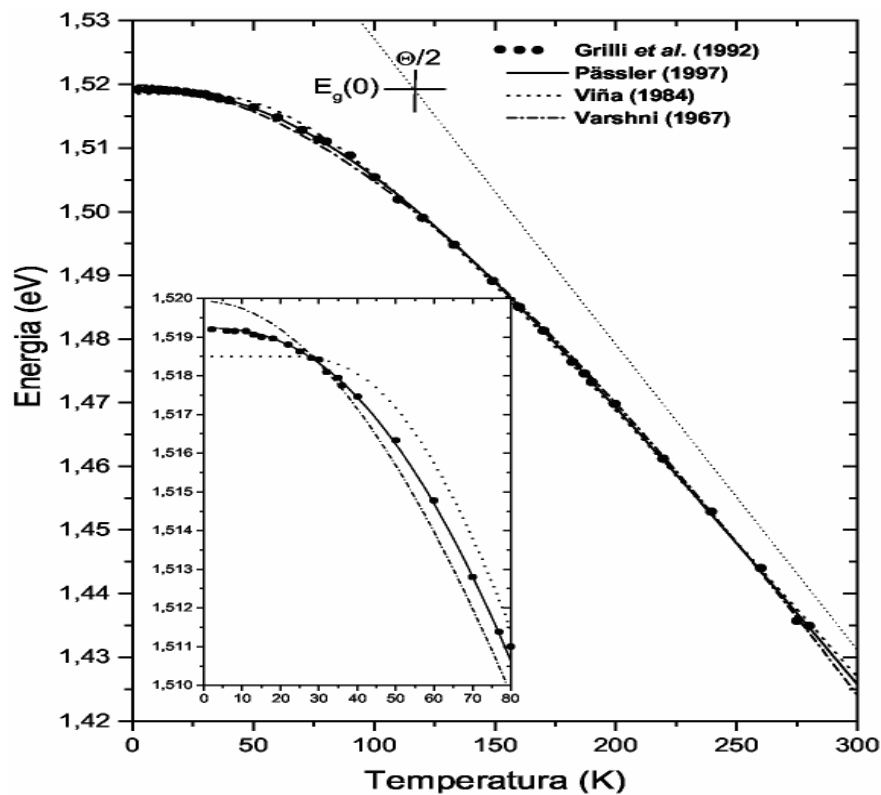


Figura 3.1 – Comparação entre os três modelos que descrevem a variação do “gap” de energia do GaAs com a temperatura (Equação 3.3, Equação 3.7 e Equação 3.11) para o GaAs. Os valores experimentais, que são representados por pontos, foram obtidos através da técnica de fotoluminescência por Grilli *et al.*^[3.35] para o GaAs e redigitalizados, posteriormente, por Pässler.^[3.16] A linha pontilhada indica a curva assintótica no limite de altas temperaturas ($E_g(T) = E_g(T=0) - \alpha(T - \Theta/2)$). A intersecção entre a linha pontilhada e a reta paralela à escala de temperatura que passa sobre $E_g(T=0)$, representada pela cruz, marca o ponto $\beta = \Theta/2 = 112.8$ K.

Na Figura 3.2 apresentamos a variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para a liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com concentração de Al de 0.30.^[3.27] O mesmo padrão obtido para o GaAs “bulk” (Figura 3.1) foi verificado aqui para a liga

ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Pode-se verificar que os parâmetros de ajuste de todos os modelos aumentam com a concentração de Al.^[3.27]

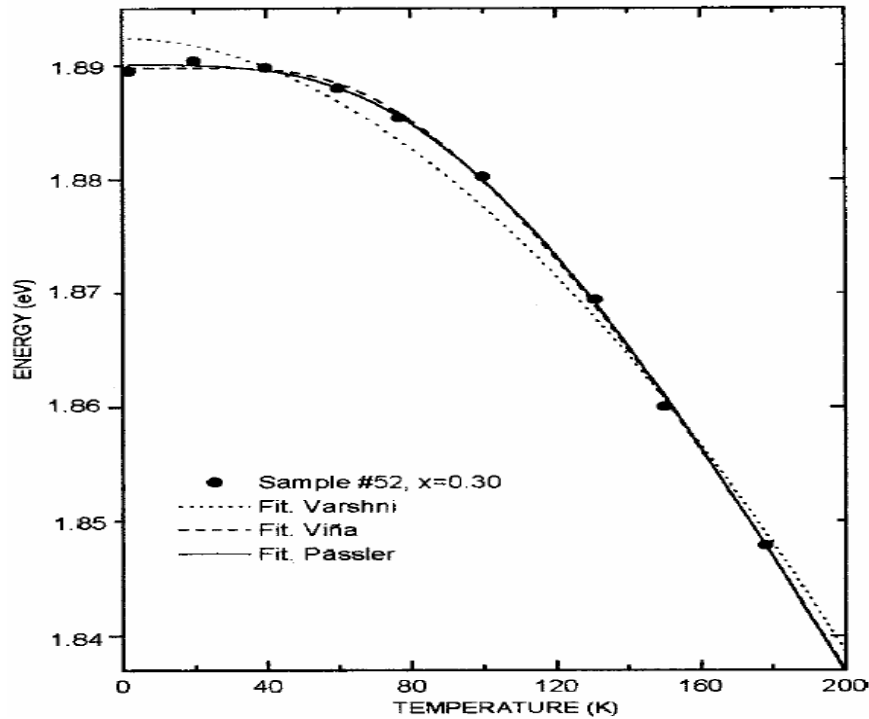


Figura 3.2 – Comparação entre os três modelos de Varshni (linha pontilhada), Viña (linha tracejada) e Pässler (linha sólida) e dados experimentais da variação do pico de fotoluminescência em função da temperatura da liga ternária de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $x = 0.30$.^[3.76]

Na Figura 3.3 mostramos a variação do pico de energia do espectro de fotoluminescência com a temperatura da heteroestrutura de poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Novamente o padrão mostrado nas Figuras 3.1 e 3.2 para os casos do GaAs “bulk” e da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ foi reproduzido pela heteroestrutura de poço quântico. Na região de baixas temperaturas, pode-se notar que o modelo de Varshni superestima a curva experimental, o modelo de Viña apresenta um comportamento tipo platô e o modelo de Pässler fornece o melhor ajuste.

Até recentemente acreditava-se que a variação da recombinação excitônica com a temperatura em poços quânticos fossem semelhantes à variação do “gap” de energia do material “bulk”.^[3.26,3.39-3.46] Trabalhos recentes^[3.47,3.76] contudo trouxeram evidências que a variação do “gap” em poços quânticos depende da concentração de Al na barreira.

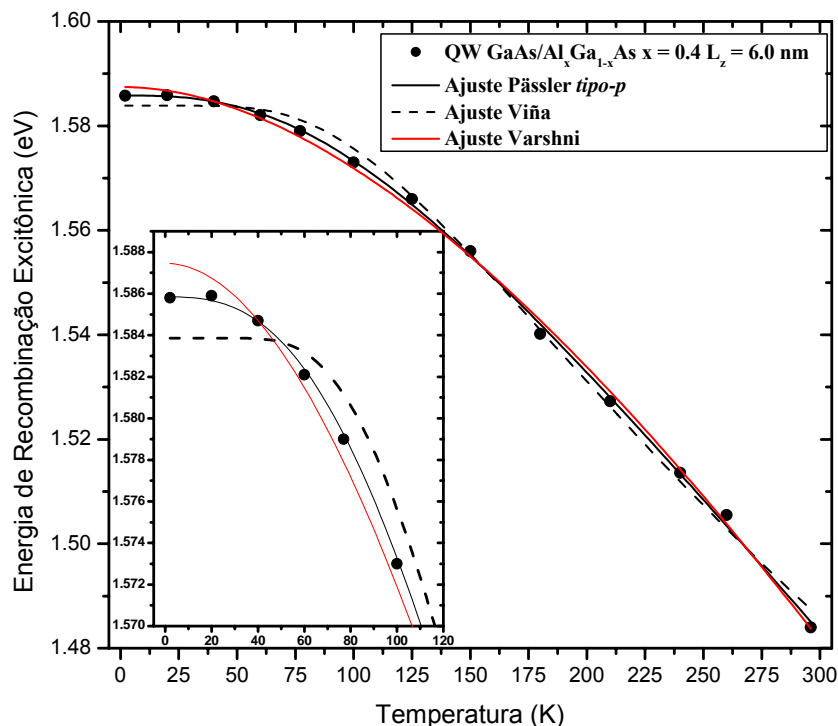


Figura 3.3 – Ajuste através dos modelos de Varshni, Viña e Pässler *tipo-p* para a curva de variação do pico de fotoluminescência em função da temperatura em poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs, $x = 0.40$, largura de 60 Å. Uma ampliação da região de baixas temperaturas é mostrada em detalhe.^[3.47]

Na Figura 3.4 mostramos os valores dos parâmetros de ajuste dos modelos de Viña e Pässler *tipo-p* em função da concentração de Al obtidos por S. A. Lourenço *et al.*^[3.47,3.76] Os parâmetros de ajuste mostram um comportamento peculiar em função da concentração de Al. Inicialmente os valores dos parâmetros para baixas concentrações de Al são inferiores aos valores para o GaAs “bulk” e aumentam com o aumento da concentração de Al na barreira. O resultado – valor inferior ao do GaAs “bulk” para baixas concentrações de Al – foi atribuído a possíveis efeitos do confinamento.^[3.47] Resultados semelhantes foram obtidos para outras heteroestruturas como, poços quânticos com “spike”^[3.30] e super-redes de InGaAs/InGaAlAs:Si.^[3.29]

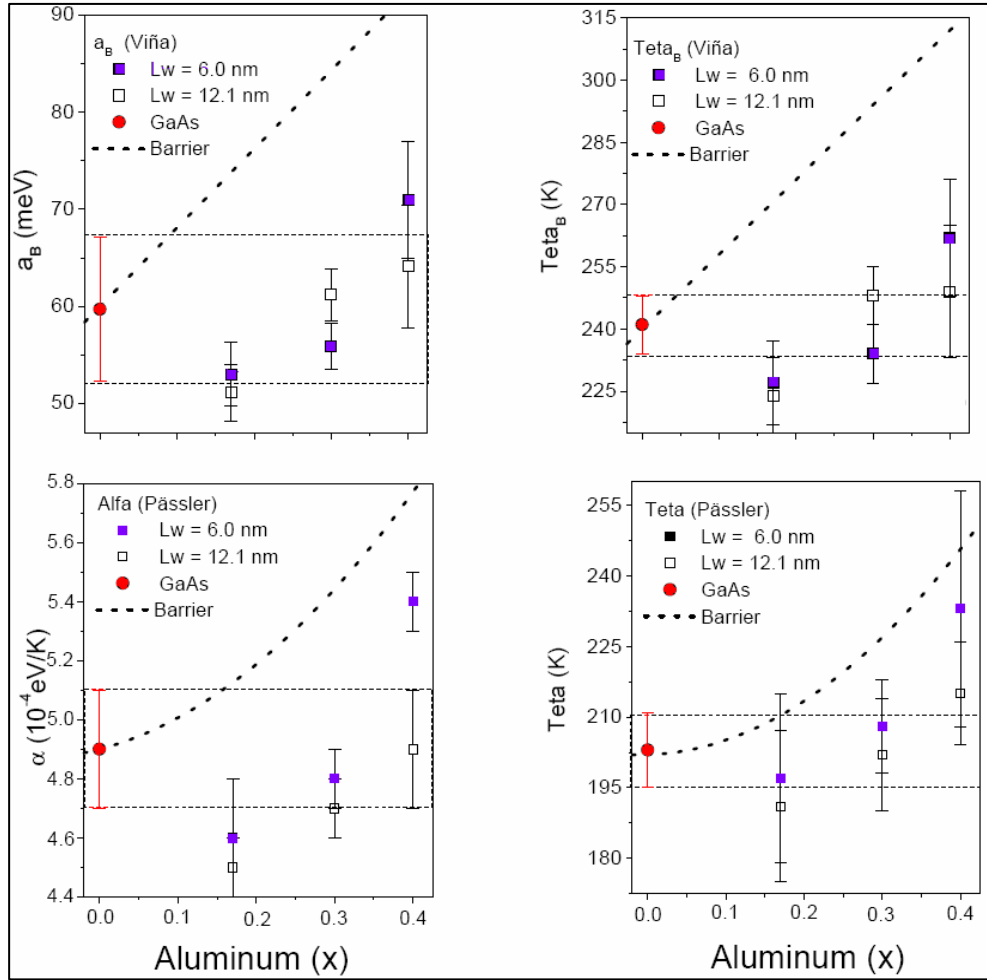


Figura 3.4 – Dependência com a composição de Al dos parâmetros de Viña (A, B) e Pässler *tipo-p* (C, D).^[3.47]

Em resumo, o modelo de Varshni é incapaz de fornecer interpretações físicas adequadas para o comportamento da energia de recombinação excitônica com a temperatura.^[3.31] O modelo de Viña não oferece bons ajustes para baixas temperaturas, por desprezar a presença de fônons acústicos. O modelo de Pässler *tipo-p*, em todos os casos e intervalos de temperatura, mostra um melhor ajuste das curvas experimentais. Os parâmetros de ajuste dos diferentes modelos sentem os efeitos do confinamento e variam com a concentração de Al nas heteroestruturas de poços quânticos.

O modelo de Pässler *tipo- ρ* ^[3.21] não foi utilizado nestes trabalhos até aqui apresentados, mas será utilizado nesta dissertação por fornecer ajustes melhores que o modelo proposto por Viña e por ser uma proposta que visa separar a contribuição dos fônons acústicos dos ópticos.

Neste trabalho fizemos uma análise destes efeitos em poços quânticos de AlGaAs/GaAs com 60 Å de espessura nominal, no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K, com concentração de Al variando entre $0 < x < 0.35$. Para que pudéssemos estudar os efeitos do aumento da concentração de Al e do confinamento quântico sobre os parâmetros de ajuste de $E_g(T)$ dos modelos de Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*).

3.2 INFLUÊNCIA DAS FLUTUAÇÕES DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DAS BARREIRAS SOBRE A FORMA DE LINHA DAS RECOMBINAÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS QUÂNTICOS DE $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$

Nas ligas ternárias e quaternárias volumétricas (“bulk”) pode ocorrer desordem composicional dos elementos constituintes ao longo da amostra, devido à separação de fase resultante do “gap” de miscibilidade.^[3.48,3.49] Esta variação na composição da liga gera flutuações no potencial eletrostático ao longo do material.^[3.50] A variação na composição da liga corresponde a uma modulação na energia de “gap” ao longo da amostra. Um espectro de fotoluminescência (PL) obtido em amostras com estas flutuações de potencial corresponde a uma superposição de muitas linhas de emissão relativas às diferentes energias de “gap” associadas a estas flutuações, o que torna o espectro consideravelmente alargado.^[3.50]

Em estruturas de QWs (do inglês Quantum Wells) baseados em semicondutores III-V, II-VI e suas ligas, flutuações na largura do poço (micro-rugosidades na interface) e na composição química das ligas que compõem o material do poço de potencial e/ou da barreira de confinamento são fontes de desordem que modulam o perfil local do potencial de confinamento da heteroestrutura e afetam fortemente suas propriedades ópticas. Por razões relacionadas à dinâmica de deposição das camadas, as interfaces nunca são perfeitamente abruptas, inevitavelmente apresentando rugosidades. Estas imperfeições estruturais podem ser ilhas do material B (barreira) ocorrendo na região do material A (poço) e vales de material A ocorrendo na região B.

Em sistemas onde as amplitudes das flutuações são baixas (sistemas com baixa desordem, como é o caso dos QWs de AlGaAs/GaAs) a termalização dos éxcitons é completa. Com o aumento da temperatura (a partir de $T = 8$ K) os éxcitons são transferidos termicamente para estados de maior energia no rabo da banda até atingir a borda da banda de condução, deslocando E_{PL} em direção a maiores energias (“blue-shift”). Na Figura 3.5

apresentamos um esquema do potencial aleatório gerado pelas imperfeições da heteroestrutura (rugosidades da interface e desordem composicional). Com um incremento ainda maior na temperatura, a energia térmica vence a energia de localização excitônica e a forma de linha do espectro de PL torna-se uma forma de linha característica de éxcitons livres (FE), dando início ao “red-shift” característico da dependência do “gap” de energia dos materiais semicondutores com T . Observa-se geralmente neste caso que, com o aumento da temperatura ocorre uma redução no “Stokes shift” (SS), que é a diferença entre a energia de absorção (PLE, PR) e a energia do pico excitônico determinado por fotoluminescência. Este comportamento foi observado em ligas de $Zn_xHg_{1-x}Te$ [3.54] e poços quânticos de $AlGaAs/GaAs$ [3.61,3.62] e de $InGaAs/InP$. [3.66]

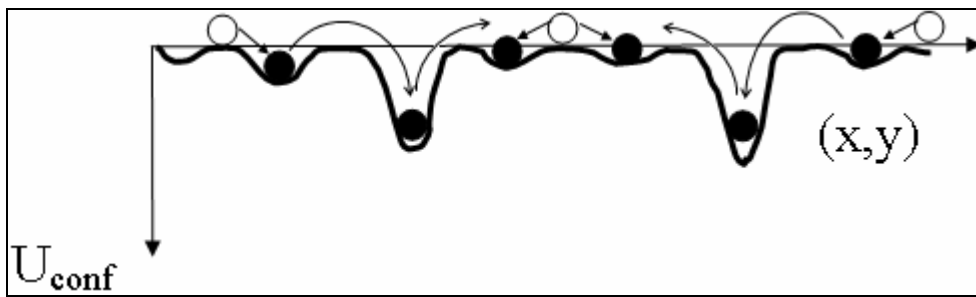


Figura 3.5 – Esquema do potencial de confinamento aleatório (U_{conf}) ao longo do plano xy do poço quântico. Círculos claros representam éxcitons livres. As setas indicam os processos de relaxação para os mínimos locais ou absolutos do potencial. Círculos escuros representam os éxcitons ainda localizados nestes mínimos. [3.52]

Estas desordens possuem um forte efeito sobre o movimento dos portadores e as recombinações radiativas para baixas temperaturas e baixas potências de excitação são geralmente dominadas por éxcitons localizados (Figura 3.5). [3.53-3.64] As flutuações do potencial de confinamento resultam em um prolongamento (“band-tail”) na densidade de estados excitônica (DOS) abaixo da distribuição dos estados fundamentais da heteroestrutura, como pode ser visto na Figura 3.6a. As recombinações radiativas dos estados do “band-tail” são deslocadas para baixas energias com relação às energias de recombinação dos éxcitons deslocalizados, e o espectro de fotoluminescência a baixas temperaturas e baixas intensidades de excitação é assimétrico com um rabo exponencial do lado de baixa energia (Figura 3.6b). Tal forma de linha do espectro de PL tem sido usada como uma impressão digital das recombinações de éxcitons localizados nas desordens microscópicas presentes no material semiconductor. [3.54,3.55] Os efeitos de flutuação de potencial freqüentemente se manifestam de

formas distintas que estão, a princípio, relacionadas à magnitude da flutuação de potencial presente na amostra.

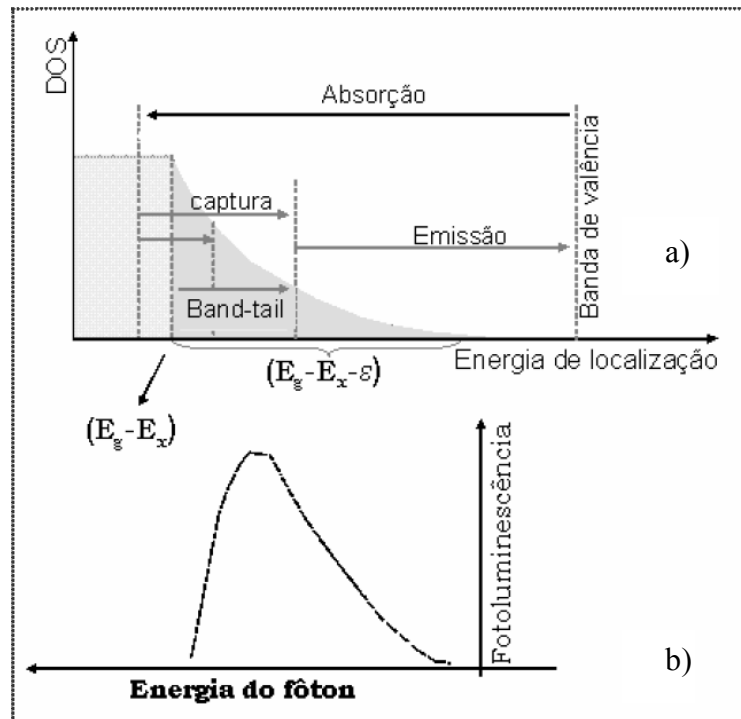


Figura 3.6 – (a) Densidade de estados bidimensional com uma cauda exponencial que reflete a flutuação do potencial ao longo do plano (x,y) e a flutuação da composição química da liga. E_g é a energia (e_1-hh_1) no poço, E_x é a energia de ligação do éxciton e ϵ é a energia de localização. (b) sinal medido em um experimento de PL mostrando recombinação radiativa dos portadores (éxcitons) localizados nos mínimos do potencial.^[3.66]

Os efeitos das flutuações do potencial de confinamento sobre o processo de recombinação excitônica em poços quânticos têm sido comumente analisadas em termos das flutuações da largura do QW.^[3.56-3.64,3.67,3.68] Flutuações da composição química da barreira (AlGaAs no caso do sistema AlGaAs/GaAs, por exemplo) são freqüentemente desconsideradas ou deixadas em segundo plano. O estudo é geralmente conduzido pela dependência da largura de linha das recombinações excitônicas em função da largura do poço^[3.69,3.70] ou pela posição da energia do pico de PL (E_{PL}) em função da temperatura.^[3.67,3.68,3.71-3.76]

A influência da concentração de Al em poços quânticos de AlGaAs/GaAs sobre o comportamento das transições excitônicas em função da temperatura foi mostrada em trabalhos recentes.^[3.46,3.76] Nestes trabalhos ficou evidente que a penetração da função de onda do éxciton na barreira de potencial permite o acoplamento deste com os fônons do material

constituente da barreira, no caso a liga AlGaAs. O comportamento da transição excitônica com a temperatura para $T > 60$ K ressalta a interação do éxciton com os fônons ópticos LO. A energia dos fônons LO e a intensidade da interação éxciton-fônon-LO aumentam com a concentração de Al, o que leva a um maior valor da largura de linha da emissão excitônica e reforça a variação do gap de energia com T, principalmente na região de altas temperaturas ($T > 150$ K) onde o coeficiente de variação do gap com T (dE/dT) é constante.^[3,27] Na região de baixas temperaturas a interação éxciton-fônon é determinada pelos fônons acústicos LA que, entretanto não depende da concentração de Al. Assim, um estudo a baixas temperaturas ($8 \text{ K} \leq T \leq 60 \text{ K}$) e baixas intensidades de excitação em poços quânticos de AlGaAs/GaAs com variação da concentração de Al permite analisar os defeitos das interface e da flutuação da composição química da liga sobre a forma de linha da luminescência. Com o aumento da intensidade de excitação podemos blindar ou saturar as flutuações e, em tese, analisar somente a influência dos fônons acústicos na variação do “gap” com a temperatura.

4 TÉCNICAS EXPERIMENTAIS E AMOSTRAS UTILIZADAS

4.1 TÉCNICA DE CRESCIMENTO EPITAXIAL POR FEIXE MOLECULAR (MBE)

A técnica de Epitaxia por Feixe Molecular – MBE “Molecular Beam Epitaxy” de crescimento de cristais semicondutores surgiu em meados dos anos sessenta, a partir dos estudos de Arthur ^[4.1] e Cho ^[4.2] sobre os aspectos fundamentais da interação de átomos de Ga e moléculas de As com substratos cristalinos de GaAs sob condições de ultra-alto-vácuo (UAV) (10^{-10} Torr) nos laboratórios da Bell . A característica principal da técnica de epitaxia por feixe molecular é sua baixa velocidade de crescimento de, aproximadamente, um plano cristalino ou uma monocamada por segundo (~ 0.283 nm/s para o GaAs e AlAs). Diversos tipos de materiais semicondutores, tais como semicondutores elementares como Si e Ge, binários como GaAs, InP, GaAsSb, etc. ligas ternárias como AlGaAs, InGaAs, etc., ligas quaternárias como AlGaAsSb, AlGaInAs, InGaAsP, etc. e até mesmo heteroestruturas de poços quânticos contendo barreiras com ligas quindenárias como o GaInAsNSb/GaAs ^[4.3] são hoje em dia crescidos por esta técnica.

O crescimento de cristais semicondutores por MBE ocorre em uma câmara de ultra-alto-vácuo, onde os feixes de átomos ou moléculas, gerados termicamente, incidem sobre um substrato (cristal semicondutor) aquecido. Os elementos de alta pureza (Ga, In, Al, As, Si, Be, etc), colocados nas células térmicas de efusão (células de Knudsen), são evaporados gerando feixes atômicos e moleculares que estão direcionados para o substrato. Devido à baixa pressão no ambiente do crescimento (10^{-10} Torr) o livre caminho médio dos átomos corresponde a cerca de 50 m, ^[4.4] valor este muito maior que as dimensões da câmara. Desta forma choques entre os átomos dos feixes e elementos residuais na câmara são desprezíveis.

A dinâmica de crescimento ocorre em duas etapas: a primeira consiste na adesão do átomo incidente à superfície do cristal; a segunda, no rearranjo destes átomos depositados através de movimentos superficiais a fim de atingir um ponto de estabilidade na frente do crescimento. Estes processos dependem da espécie química a ser incorporada, do fluxo relativo das espécies químicas, da temperatura do crescimento e das condições superficiais do substrato. O controle e calibração destes parâmetros são fundamentais para obterem-se amostras de alta qualidade e heteroestruturas com interfaces abruptas.

O fluxo dos elementos é controlado através de obturadores de acionamento mecânico. O tempo de acionamento é da ordem de décimos de segundos, o que possibilita o crescimento de interfaces abruptas de alta qualidade. A temperatura de cada célula de efusão é controlada separadamente para levar-se em conta as propriedades termodinâmicas de cada elemento e para garantir um controle preciso do fluxo. A representação esquemática do processo de evaporação e deposição na técnica de epitaxia por feixe molecular dos compostos III-V pode ser vista na Figura 4.1.

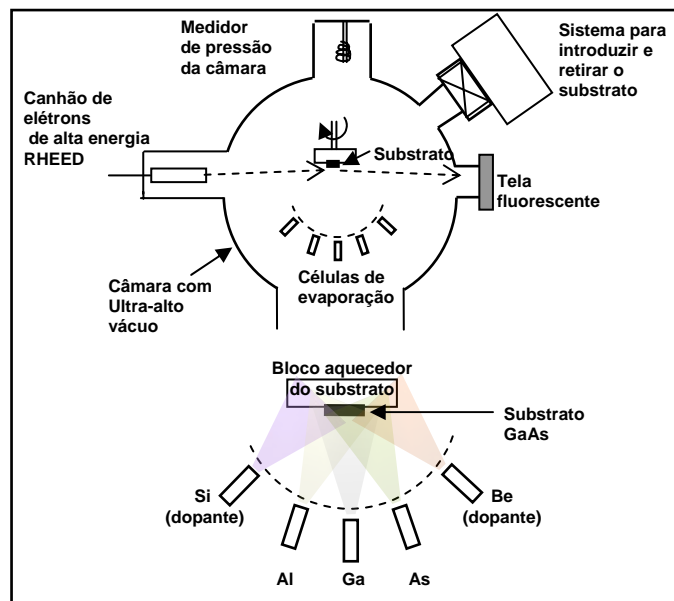


Figura 4.1 – Representação esquemática do processo de evaporação e deposição durante a epitaxia por feixe molecular dos compostos III-V.

As excelentes propriedades da técnica de MBE na produção de amostras semicondutoras decorrem das características tecnológicas dos equipamentos empregados, entre as quais podemos citar: ^[4.4]

- O controle preciso da temperatura e dos obturadores das células de efusão contendo as matérias primas para o crescimento;
- A rígida manutenção das condições de crescimento (temperatura do substrato, vácuo da câmara de crescimento, controle preciso de fluxo dos elementos a serem incorporados, etc.);
- A possibilidade de monitoramento da qualidade das amostras durante o crescimento através de técnicas de caracterização “in situ”, como por exemplo, o RHEED (do inglês “Reflection High Energy Electron Diffraction”). ^[4.5]

Não obstante à tentativa de diminuir a quantidade de contaminantes na câmara de crescimento, amostras de GaAs fabricadas por MBE normalmente apresentam comportamento levemente tipo- p ^[4.6] o que denuncia a incorporação não intencional de impurezas aceitadoras na rede cristalina. Acredita-se que tais impurezas sejam átomos de carbono ^[4.7] provenientes dos componentes da câmara de crescimento, que se incorporam à rede do GaAs em concentrações que variam de 10^{13} a 10^{14} cm^{-3} dependendo do equipamento empregado.

As amostras estudadas nesta dissertação foram preparadas utilizando o equipamento de MBE do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) pertencente ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo (IFUSP). Maiores informações sobre este equipamento de MBE podem ser encontradas nas dissertações de mestrado de A. P. Lima ^[4.8] e A. L. Sperandio. ^[4.9]

4.2 AMOSTRAS UTILIZADAS

O conjunto de amostras é composto por três amostras de poços quânticos duplos não acoplados de AlGaAs/GaAs de largura de 60 Å, de acordo com as características descritas abaixo:

#2446 – b1 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 05\%$,	b2 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 23\%$
#2447 – b1 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 11\%$,	b2 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 27\%$
#2448 – b1 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 14\%$,	b2 = $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 35\%$

Estas amostras foram crescidas no Instituto de Física da USP pela técnica de MBE, sobre um substrato de GaAs não dopado orientado na direção [100]. Foram crescidas em seqüência uma camada “buffer” de 0.1 μm , uma super-rede de 10 períodos de $[(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_{10}]$ e outra camada “buffer” de 0.2 μm de espessura. Após a segunda camada “buffer” foi crescida uma barreira de 800 Å de espessura de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (com a concentração de Al da barreira b1), o primeiro poço de 60 Å e outra barreira de 800 Å. Esta barreira foi dividida em duas partes de 400 Å cada, a primeira tem mesma concentração de Al da barreira b1 a segunda tem a concentração da barreira b2. Após a barreira b2 foi crescido o segundo poço de 60 Å e uma barreira de 800 Å com a mesma concentração de Al da barreira b2. Para

finalizar foi crescida uma camada tampão “cap layer” de GaAs. A fração molar de alumínio (x) na barreira em cada amostra foi estimada por “RHEED”.

Na Figura 4.2 mostramos uma representação esquemática da estrutura das amostras, para maiores detalhes.

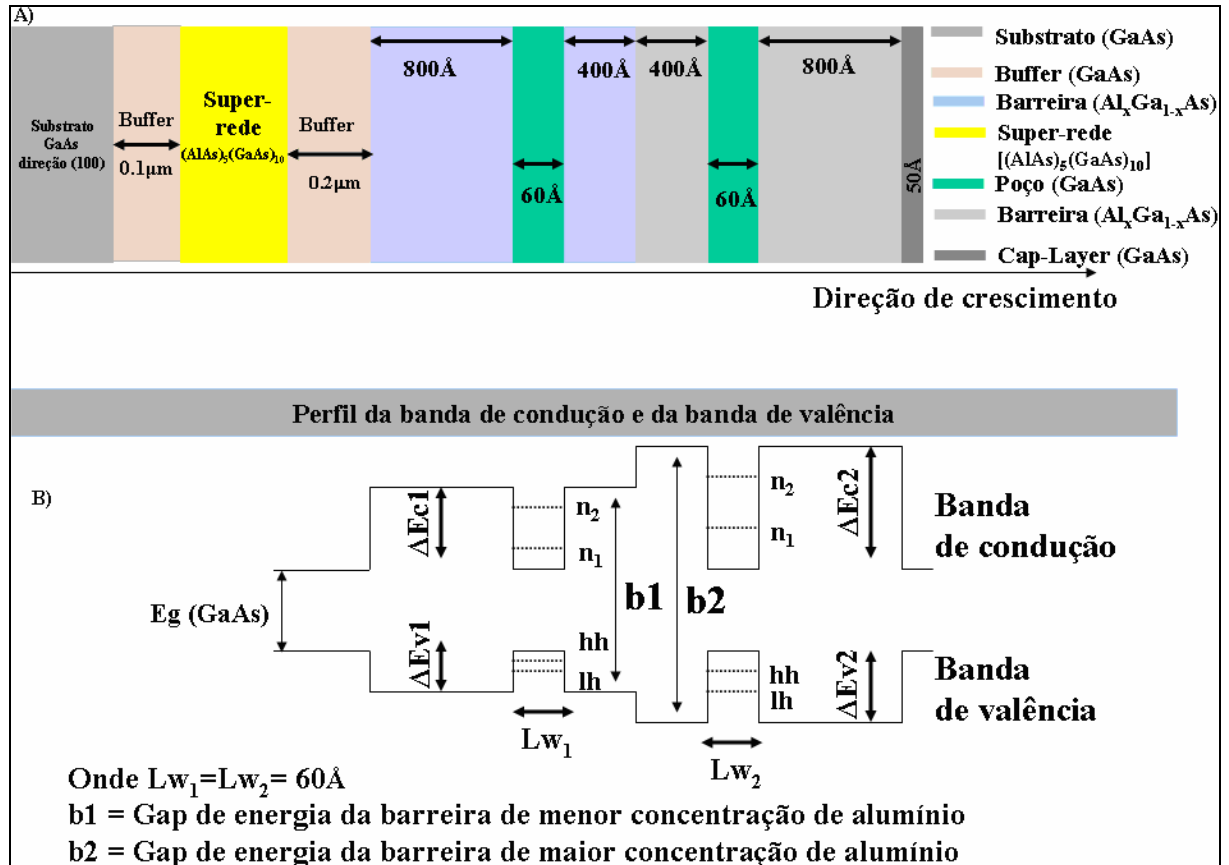


Figura 4.2 – A) Representação esquemática da estrutura de poços quânticos duplos não acoplados, com a largura nominal de cada camada. B) Representação do perfil de potencial dos dois poços quânticos.

4.3 A TÉCNICA DE FOTOLUMINESCÊNCIA

4.3.1 Introdução

Medidas ópticas em função da potência de excitação, em função da temperatura, ou na presença de campos elétricos ou magnéticos são largamente utilizadas no estudo das propriedades eletrônicas e ópticas de materiais semicondutores. Dentre as muitas

técnicas podemos destacar a fotoluminescência (PL), fotoluminescência de excitação (PLE), fotorefletância (PR), magnetoluminescência, etc. Tais técnicas ópticas podem fornecer informações importantes para o estudo e caracterização de um determinado material ou heteroestrutura semicondutora, como, por exemplo, a energia de “gap”, a qualidade da amostra (condições cristalográficas, etc.), a natureza e a concentração de impurezas, etc. A técnica de fotoluminescência é bastante utilizada no estudo das propriedades de materiais e heteroestruturas de materiais semicondutores por apresentar muitas vantagens, dentre elas, a de ser uma técnica não destrutiva e não requerer preparação especial da amostra (essencial em eletrorefletância, por exemplo), etc. Além disso, o aparato experimental necessário para a montagem dessa técnica é relativamente simples, já que os equipamentos utilizados são equipamentos essenciais em um laboratório de espectroscopia óptica (como, por exemplo, monocromador, laser e amplificador “lock-in”).

4.3.2 Princípios Físicos da Fotoluminescência

A principal característica de materiais semicondutores é a presença de uma banda de valores proibidos de energia, chamada “gap” de energia. Com o semicondutor a baixas temperaturas (próximas ao zero absoluto), todos os elétrons se encontram na banda de valência (BV) e todos os estados disponíveis (vazios) estão na banda de condução (BC). Quando um feixe de luz com energia maior que a energia do “gap” do material atinge o cristal semicondutor, ocorre a promoção de elétrons da banda de valência para estados disponíveis na banda de condução, criando buracos na banda de valência. Este processo gera um par elétron-buraco através de transições verticais no espaço dos momentos. Uma vez que a energia dos fótons incidentes é maior que o “gap” de energia do material, estes elétrons e buracos terão um excesso de energia em relação ao estado fundamental de suas respectivas bandas. Estes portadores sofrem relaxação intrabanda através de transições não-radiativas (como a emissão de fônons ópticos e acústicos) de modo que os elétrons atinjam o fundo da banda de condução e os buracos atinjam o topo da banda de valência. Finalmente, ocorre a recombinação radiativa dos elétrons com os buracos, durante a qual são gerados fótons de energia igual ao valor do “gap” do material. Este processo está representado na Figura 4.3. Analisando o sinal emitido pela amostra, pode-se construir um gráfico da intensidade de emissão em função de sua energia, que é chamado de espectro de emissão ou simplesmente espectro de fotoluminescência PL – “photoluminescence”.

No caso dos semicondutores de “gap” direto a recombinação se dá verticalmente no espaço dos momentos e pode ocorrer diretamente entre o mínimo de energia da banda de condução e o topo da banda de valência, ou ser precedida pela captura dos portadores por estados eventualmente presentes associados a impurezas e/ou defeitos.

A interação coulombiana entre o elétron na banda de condução e o buraco na banda de valência gera um par ligado denominado éxciton. No material “bulk” podemos entender o éxciton como um sistema composto por uma carga positiva fornecida pelo buraco e uma carga negativa fornecida pelo elétron, análogo ao átomo de hidrogênio. A energia de ligação coulombiana entre essas duas cargas no GaAs “bulk” é da ordem de 5 meV. Essa energia é pequena e a temperaturas da ordem de 60 K não é mais possível detectar o éxciton (por técnica de PL, por exemplo). A energia de vibração dos átomos constituintes da rede cristalina a essa temperatura é suficiente para quebrar o vínculo entre os dois tipos de portadores de carga.

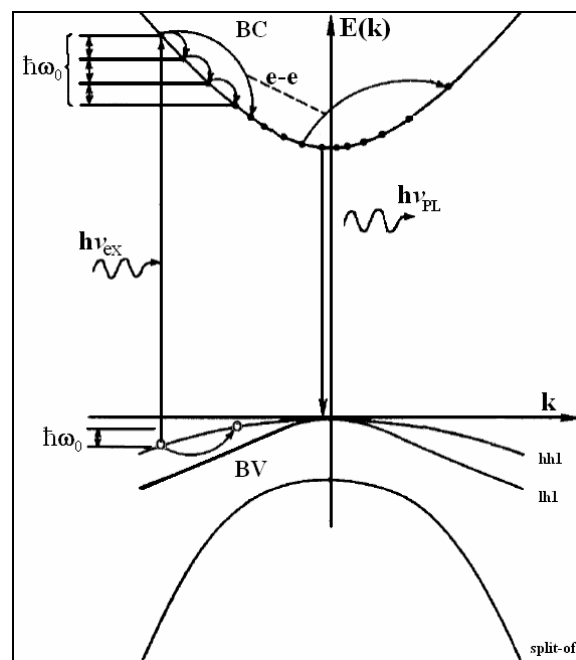


Figura 4.3 – Representação esquemática da termalização de elétron quente e recombinação radiativa com buracos ligados a aceitadores para o GaAs. A luz incidente de energia $h\nu_{ex}$ excita um par de elétron-buraco e a luminescência é emitida com energia de $h\nu_{PL}$. Dois processos de espalhamento incluindo emissão de fônons ópticos LO ($\hbar\omega_0$) e espalhamento elétron-elétron (indicados pela linha tracejada denominada e-e) são mostrados.^[4.10]

No caso do poço quântico o elétron e o buraco estão confinados dentro do poço. Isto os obriga a permanecerem mais próximos, aumentando a interação coulombiana entre as cargas, de tal modo que o raio do éxciton diminui consideravelmente e a energia de interação

aumenta de 3 a 4 vezes comparativamente à do éxciton no material “bulk”. Deste modo, em poços quânticos existem transições excitônicas até a temperatura de funcionamento dos dispositivos optoeletrônicos (~ 300 K).^[4.11]

A fotoluminescência consiste basicamente em estudar os processos que envolvem a emissão de radiação eletromagnética originada nos processos de recombinação, através da análise espectral da radiação emitida quando o material é excitado por radiação eletromagnética de energia geralmente maior do que a energia de “gap”.

Apresentaremos a seguir os processos envolvidos na emissão em heteroestruturas de poços quânticos, objetivo de nosso estudo.

Os processos de emissão radiativa podem ser subdivididos em dois grupos: emissões intrínsecas e emissões extrínsecas.

I Emissões Intrínsecas

A emissão é denominada intrínseca se está associada a processos que envolvem o material semiconductor (ou a estrutura semicondutora) propriamente dito, em contraposição à emissão extrínseca que está associada a transições envolvendo impurezas. A Figura 4.4, mostrada a seguir, ilustra esquematicamente as possíveis recombinações discutidas neste item.

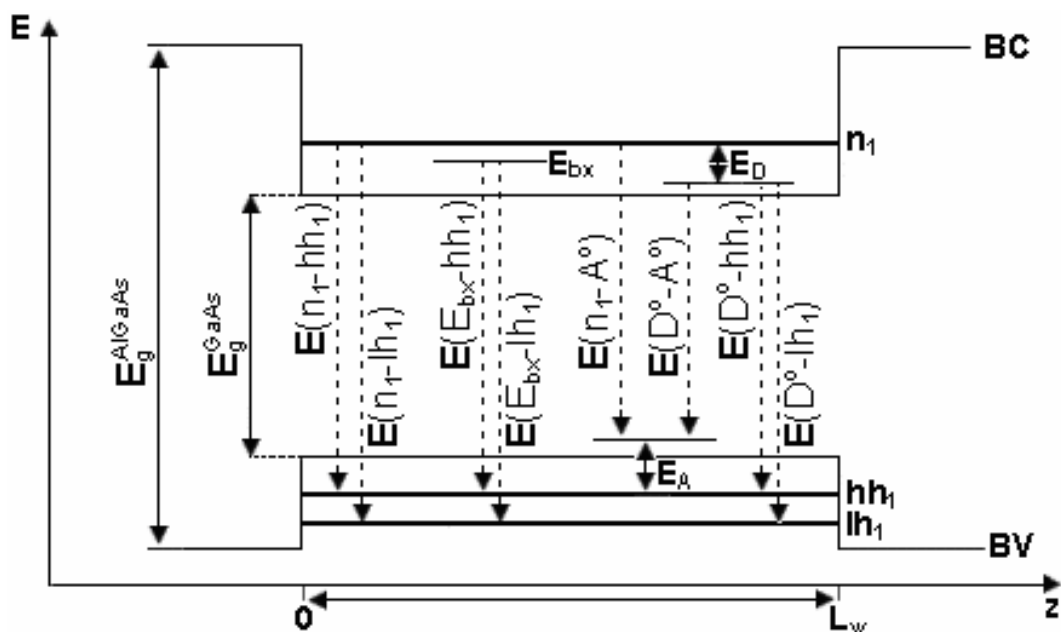


Figura 4.4 – Representação esquemática das possíveis recombinações em um poço quântico de GaAs/AlGaAs.

I.a Emissão de Éxcitons Livres (EX)

Como no material “bulk” uma vez formados os pares elétron-buraco, através da absorção de luz, tanto os elétrons quanto os buracos foto-criados tendem a relaxar para os respectivos estados de mais baixa energia (n_1, hh_1, lh_1) e devido a interação coulombiana formam-se os éxcitons. Quando o elétron e o buraco constituintes do éxciton se recombinam ocorre a emissão de um fóton, cuja energia é dada por:

$$h\nu_1 = E_g^{GaAs} + E_n + E_{hhm} - E_{bx} \quad (4.1)$$

ou

$$h\nu_2 = E_g^{GaAs} + E_n + E_{lhm} - E_{bx} \quad (4.2)$$

onde E_g^{GaAs} é o “gap” de energia do GaAs “bulk”, E_n é o n-ésimo nível de energia de confinamento do elétron, E_{hhm} é o m-ésimo nível de energia de confinamento do buraco pesado, E_{lhm} é o m-ésimo nível de energia de confinamento do buraco leve e E_{bx} é a energia de ligação do éxciton.

Em poços quânticos, para cada sub-banda eletrônica, a interação coulombiana gera éxcitons, relacionados ao buraco pesado e ao buraco leve. A probabilidade de recombinação excitônica é consideravelmente alta quando os números quânticos de confinamento são os mesmos, ou seja, para $n = m$ (vide Capítulo 2). Dessa forma as transições excitônicas $E_n - E_{hhn}$ e $E_n - E_{lhn}$ podem aparecer aos pares. Em baixas temperaturas e baixas potências de excitação somente a recombinação excitônica relacionada ao buraco pesado pode ser observada em PL. Nessas condições não há energia térmica suficiente para que os buracos ocupem o nível de buracos leves e a potência de excitação não provoca a saturação do nível de buracos pesados. Os buracos opticamente gerados no nível de buracos leves relaxam não-radiativamente para o nível de buracos pesados, recombinando a partir desse nível.

I.b Emissão da Banda de Condução para a Banda de Valência

Transições da banda de condução para a banda de valência (denominadas transições banda-banda) consistem na recombinação de um elétron da BC com um buraco da BV em um semiconductor “bulk”. Em um poço quântico estas transições se dão do nível de energia dos elétrons (E_n) para o nível de energia dos buracos (E_{hhm} ou E_{lhm}). Estas transições podem ser observadas, em geral, a temperaturas superiores a 50 K, pois a baixas temperaturas

as recombinações excitônicas são dominantes.^[4.12] Este processo de recombinação pode se dar através da emissão de um fóton de energia igual à:

$$h\nu_1 = E_g^{GaAs} + E_n + E_{hhm} \quad (4.3)$$

ou

$$h\nu_2 = E_g^{GaAs} + E_n + E_{lhm} \quad (4.4)$$

onde E_g^{GaAs} , E_n , E_{hhm} e E_{lhm} têm os mesmos significados que anteriormente.

Neste caso, assim como para a emissão de éxcitons livres, também vale a regra de seleção $n = m$ e, como mencionado anteriormente, em PL, geralmente são observadas apenas transições referentes à $n = m = 1$.

II Emissões Extrínsecas

A emissão é denominada extrínseca se está associada a transições envolvendo impurezas.

II.a – Emissão de Éxcitons Ligados

Os éxcitons podem formar complexos ligando-se com impurezas neutras ou ionizadas. Geralmente éxcitons livres e ligados podem ser observados em um mesmo material.^[4.13] A identificação da emissão pode ser realizada pela energia da emissão: os estados ligados possuem energias de recombinação menores do que os éxcitons livres. Nestes processos de recombinação considerando os níveis fundamentais para o elétron e o buraco ($n = 1$ e $m = 1$) ocorre a emissão de um fóton de energia:

$$h\nu = [E_g^{GaAs} + E_1 + E_{hh1}] - E_{bx} - BE, \quad (4.5)$$

onde BE é a energia de ligação do complexo excitônico.

II.b Emissão Banda - Impureza

As emissões relacionadas com a recombinação de um nível eletrônico (na banda de condução) para o nível de uma impureza aceitadora ou a recombinação do nível de energia de uma impureza doadora para um nível de energia de buraco (na banda de valência) são denominadas transições banda - impureza. A energia destas recombinações, considerando os níveis fundamentais para o elétron e para o buraco ($n = 1$ e $m = 1$), é dada por:

$$h\nu_1 = [E_g^{GaAs} + E_1 + E_{hh1}] - E_A \quad (4.6)$$

ou

$$h\nu_2 = [E_g^{GaAs} + E_1 + E_{hh1}] - E_D \quad (4.7)$$

onde E_A é a energia de ligação da impureza aceitadora e E_D é a energia de ligação da impureza doadora.

Em poços quânticos, a energia E_A necessária para retirar um buraco do estado aceitador neutro para o estado de buraco pesado pode ser estimada a partir do espectro de fotoluminescência através da identificação da energia excitônica, $E(E_{bx} - hh_1)$, da energia do pico da luminescência extrínseca, $E(n_1 - A^0)$, e do conhecimento da energia de ligação excitônica de buracos pesados, $E_{bx}(hh)$. Dessa forma a energia de ionização do aceitador pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$E_A = E(E_{bx} - hh_1) - E(n_1 - A^0) + E_{bx}(hh) \quad (4.8)$$

O erro da energia E_A obtida desta maneira é estimado em aproximadamente ± 1 meV ^[4.14].

II.c Recombinação Doador-Aceitador ($D^0 - A^0$)

A transição entre um elétron ligado a um átomo doador e um buraco ligado a um átomo aceitador é chamada recombinação doador-aceitador. O fóton emitido pela transição óptica referente a este processo, considerando os níveis fundamentais para o elétron e para o buraco ($n = 1$ e $m = 1$), tem energia igual a: ^[4.15]

$$h\nu = [E_g^{GaAs} + E_1 + E_{hh1}] - [E_D + E_A] + \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (4.9)$$

onde E_D e E_A são, respectivamente, as energias de ligação das impurezas doadora e aceitadora isoladas e $e^2/\epsilon r$ é o termo associado à energia de emparelhamento entre o par ligado, onde r é a distância entre o par ligado e ϵ a constante dielétrica do meio.

Os processos de recombinação que acabamos de descrever possuem comportamentos distintos em função de alguns parâmetros experimentais utilizados em uma experiência de fotoluminescência. Dentre estes parâmetros podemos citar: a temperatura a que o cristal está submetido, a intensidade de excitação que incide sobre o material (W/cm^2), a pressão hidrostática imposta ao material, etc. Desta forma, uma experiência de PL realizada com a variação de alguns destes parâmetros pode auxiliar na interpretação dos processos de recombinação do material e, conseqüentemente, na caracterização óptica do sistema em estudo.

4.4 DESCRIÇÃO DO ARRANJO EXPERIMENTAL DA TÉCNICA DE FOTOLUMINESCÊNCIA

Esta descrição corresponde à montagem de fotoluminescência existente no Laboratório de Óptica e Optoeletrônica do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina (UEL) onde foram realizadas as medidas de fotoluminescência no conjunto de amostras, detalhadas na seção 4.2. A montagem experimental de fotoluminescência está esquematizada na Figura 4.5.

A fonte de excitação utilizada na técnica de PL é um laser de Ar^+ , emitindo na linha 5145 Å, adequadamente refrigerado a água e modulado mecanicamente por um “chopper” na frequência de 200 Hz. O raio da cintura do laser “spot” sobre a amostra é de aproximadamente 121 μm para uma corrente de 20 A. A amostra semicondutora é fixada, com a utilização de “cola prata”, a um porta-amostra localizado no interior de um criostato, o qual é acoplado à um sistema de vácuo (composto por uma bomba mecânica e uma bomba turbo – molecular) que permite atingir pressões da ordem de 10^{-6} Torr. Esta pressão é necessária para que o sistema de ciclo fechado de Hélio possibilite a obtenção de baixas temperaturas, permitindo, no nosso caso, que a temperatura da amostra possa ser variada desde 8.5 até 300 K.

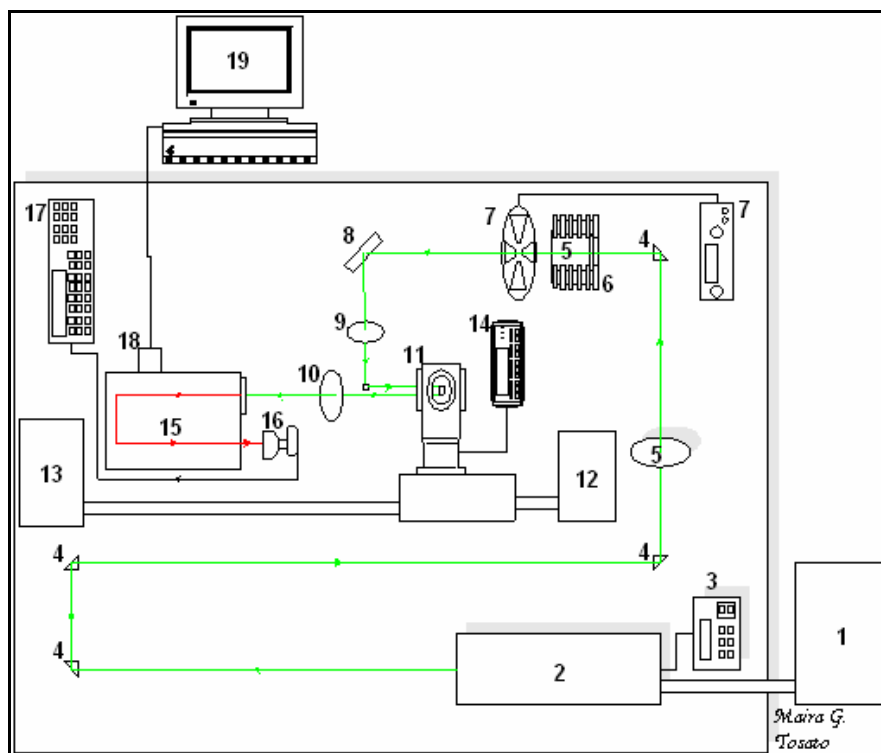


Figura 4.5 – Esquema da técnica de fotoluminescência: 1 – Refrigeração do laser, 2 – Laser de Ar^+ , 3 – Controlador do Laser, 4 – Prismas, 5 – Filtros de densidade neutra, 6 – Suporte para filtros, 7 – “Chopper”, 8 – Espelhos, 9 – Lente focalizadora, 10 – Lente coletora, 11 – Criostato, 12 – Sistema de vácuo, 13 – Compressor, 14 – Controlador de temperatura, 15 – Monocromador, 16 – Fotodetector, 17 – “Lock-in”, 18 – Motor de passo, 19 – Sistema de aquisição de dados.

A luminescência da amostra excitada é coletada e focalizada por uma lente convergente na fenda de entrada (com abertura de aproximadamente $100\ \mu\text{m}$) de um espectrômetro (Jarrell-Ash de $0,5\ \text{m}$), antes da qual utilizamos um filtro RG 695 (Schott) a fim de eliminar a radiação espalhada proveniente do laser. A grade de difração (600 linhas/mm com “blaze” em $12000\ \text{Å}$), movida por um motor de passo, faz a varredura de comprimento de onda. Um fotomultiplicador de GaAs, detecta e envia o sinal para um amplificador síncrono (“lock-in”) modelo SR510 (Stanford), o qual repassa o sinal amplificado para o sistema de aquisição, que o processa e o exibe na tela do computador. A temperatura é controlada por um sistema da LakeShore modelo 331 e a potência de excitação é controlada através da utilização de filtros de densidade neutra (ou de um filtro circular giratório) dispostos no percurso do laser.

5 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

5.1 INTRODUÇÃO

Abaixo rerepresentamos as características das amostras de poços quânticos duplos não acoplados de AlGaAs/GaAs, com largura (nominal) de 60 Å e barreiras (b_1 e b_2) de 400 Å cada.

#2446 – $b_1 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 05\%$,	$b_2 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 23\%$
#2447 – $b_1 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 11\%$,	$b_2 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 27\%$
#2448 – $b_1 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 14\%$,	$b_2 = E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ com $x = 35\%$

A largura de 60 Å para os poços foi escolhida de modo que os níveis de energia (sub-bandas) de elétrons e buracos sejam bem distintos. ^[5.1] Além disso, de acordo com R. C. Iotti *et al.* o máximo do “oscillator strength” encontra-se em $L_z \sim 60$ Å. ^[5.2] Dessa forma é possível obter espectros bem definidos e com sinal de emissão otimizado.

Estudos realizados por A. V. Gopal *et al.*, ^[5.3] R. Kumar *et al.* ^[5.4] mostram que espectros de fotoluminescência em poços quânticos com espessuras variadas e em GaAs “bulk”, desde que com condições de potência adequadas, são dominados por recombinações excitônicas envolvendo a primeira sub-banda de elétrons com a primeira sub-banda de buracos pesados (daqui em diante designadas por n_1 -hh₁).

Na Figura 5.1 apresentamos os resultados de fotoluminescência obtidos por estes e outros autores e publicados na literatura para poços quânticos a 100 K com larguras variadas (80 Å, 135 Å e 175 Å) e para o GaAs “bulk”. Fica evidente o domínio da recombinação excitônica n_1 -hh₁ até a temperatura de 100 K. Cuidados especiais têm que ser tomados para o GaAs “bulk” devido a pequena energia do estado fundamental do éxciton (4 – 5 meV) uma vez que, com o aumento da temperatura e/ou da potência de excitação outros níveis excitônicos ($n = 2, 3, \dots$) e a banda podem ser excitados.

Considerando o intervalo de 2 a 100 K com um “spot” de 250 μm e potência do laser de ~0.05 mW (~0.1 W/cm²) Grilli *et al.* ^[5.5] mostraram que o pico de intensidade mais alta no GaAs “bulk” é a recombinação excitônica de buraco pesado, n_1 -hh₁. Para T = 280 K a

contribuição de portadores livre domina o espectro, porém a posição do pico principal ainda é determinada pela transição excitônica.

Em nossas amostras, considerando estes resultados na literatura, nossos cálculos e a deconvolução do pico realizada por E. Mantovani ^[5.6] e o intervalo de temperatura (8.5 – 100 K) em questão, os picos de emissão de PL estão seguramente associados à recombinação excitônica de buraco pesado, n_1-hh_1 .

A variação do “gap” de energia em função da temperatura em materiais semicondutores ocorre devido à contribuição de dois mecanismos distintos: a interação elétron-fônon (IEF) e a expansão térmica da rede (ETR).^[5.7-5.10] De modo geral, a contribuição da expansão térmica para a variação de $E_g(T)$ é pequena comparativamente à contribuição da interação elétron-fônon. A contribuição da dilatação térmica, a temperatura ambiente, é da ordem de 2% a 20% dependendo do material semiconductor.^[5.11-5.13]

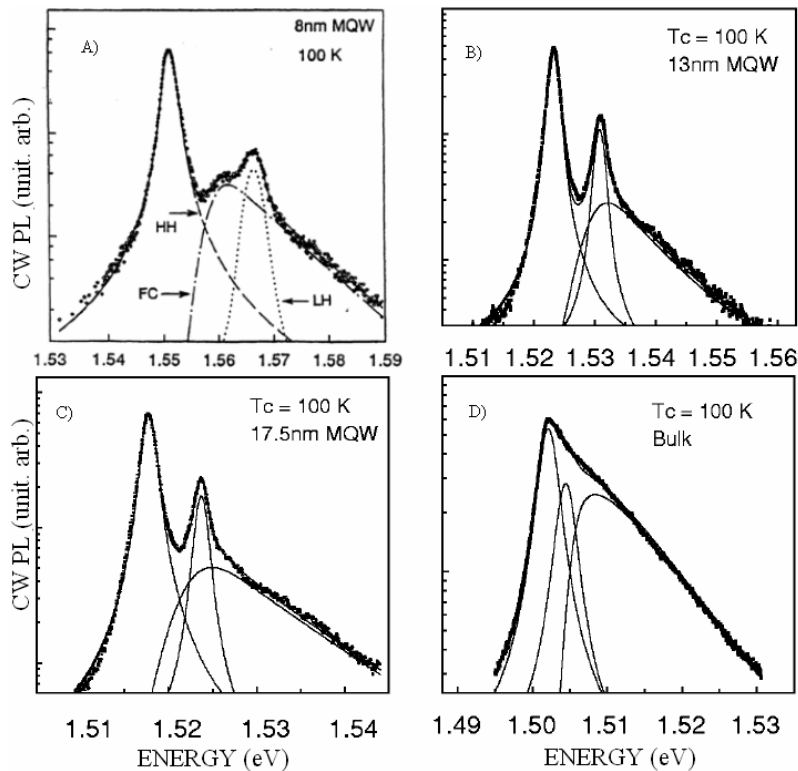


Figura 5.1 – Espectros de fotoluminescência de poços quânticos múltiplos de AlGaAs/GaAs com 80, 130 e 175 Å de espessura e GaAs “bulk”, a 100 K, medidos por A) R. Kumar *et al.*^[5.4] e B), C), D) por A. Venu Gopal *et al.*^[5.3]

D. Lürben *et al.*^[5.12] e D. Olguin *et al.*^[5.14] sugerem que a contribuição da expansão térmica da rede para a variação do “gap” no intervalo ΔT : 4 – 60 K é aproximadamente desprezível para o GaAs. Grilli *et al.*^[5.5] consideram esta contribuição

desprezível para o GaAs “bulk” no intervalo de 0 – 80 K. Resultados, para o GaAs “bulk” e para liga ternária AlGaAs, apresentados por S. A. Lourenço *et al.*^[5.13] recentemente mostraram que esta contribuição não é significativa mesmo se ampliarmos este intervalo de temperatura até $T \sim 100$ K ($\sim 2\%$). Assim, a contribuição da dilatação térmica da rede na faixa de temperatura considerada neste trabalho (8.5 – 100 K) pode ser desprezada para a variação do “gap” de energia com a temperatura. Desta forma no intervalo de 8.5 a 100 K a variação do “gap” de energia ou da recombinação excitônica com a temperatura é predominantemente devido à interação elétron-fônon.

Para os propósitos de nosso trabalho é necessário determinar quais fônons dominam a interação elétron-fônon e em que intervalo de temperatura um tipo de interação (elétron-fônon acústico ou elétron-fônon óptico) prevalece sobre a outra.

Existe na literatura certa contradição sobre o intervalo de temperatura em que a interação elétron-fônon acústico é dominante.^[5.15-5.22] É consenso que em altas temperaturas a interação com fônons acústicos é muito menor do que com ópticos.^[5.15] É também consenso que a baixas temperaturas a interação elétron-fônon acústico é dominante. Entretanto diversos autores apresentam estudos geralmente baseados na variação da parte homogênea do alargamento de linha excitônico com a temperatura com diversos valores para o limite de temperatura superior. Para o GaAs “bulk” de acordo com D. Gammon *et al.*,^[5.16] C. Weisbuch *et al.*^[5.17] e S. Rudin *et al.* a contribuição dos fônons acústicos é dominante até 150 K.^[5.18] Para poços quânticos de AlGaAs/GaAs esta contribuição é dominante até 150 K segundo D. A. B. Miller *et al.*,^[5.19] é dominante até 80 K de acordo com L. Schultheis *et al.*,^[5.20] até 70 K segundo S. Srinivas *et al.*^[5.21] e J. Lee *et al.*,^[5.15] e de acordo com T. Ruf *et al.* até 60 K.^[5.22]

As medidas foram realizadas no intervalo de temperatura de 8.5 – 100 K, para todas as amostras, permitindo-nos analisar essencialmente o comportamento dos fônons acústicos em função da variação da energia de transição excitônica com a temperatura e concentração de alumínio.

Pässler e Oelgart^[5.23] usaram um procedimento parecido para comparar o ajuste feito pelo modelo de Viña com o feito pelo modelo de Pässler *tipo-p* no intervalo $T \leq 80$ K em uma amostra de MQW de Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs com poços de 88 Å. Não discutiram entretanto o efeito da concentração de Al e da potência de excitação.

As flutuações na largura do poço (micro-rugosidade na interface) e na composição química das ligas que compõem o poço de potencial e a barreira de confinamento são fontes de desordem que modulam o perfil local do potencial de confinamento da

heteroestrutura. Estas desordens possuem um forte efeito sobre o movimento dos portadores e as recombinações radiativas para baixas temperaturas e baixas potências de excitação são geralmente dominadas por éxcitons localizados.^[5.24-5.36]

De acordo com a intensidade das flutuações do potencial e com a intensidade da potência de excitação, a forma de linha do espectro de fotoluminescência em função da temperatura apresenta diferentes comportamentos: amostras com baixa intensidade de flutuação do potencial de confinamento e sob regime de baixa potência de excitação apresentam um comportamento da energia do pico da PL (E_{PL}), com a temperatura, conhecido como “blue/redshift behavior”, isto é, a energia do pico do espectro de PL aumenta e depois diminui com o aumento gradual da temperatura.

Neste trabalho a potência de excitação foi variada sistematicamente de modo a permitir a definição aproximada da potência mínima necessária à blindagem ou saturação das flutuações. Este valor foi identificado acompanhando a variação do “gap” com a temperatura e verificando para que potência de excitação desaparecia o “blue-shift” de $E_g(T)$ nos poços quânticos. Para a potência de 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$) verificamos que o comportamento de “blue-shift” de $E_g(T)$ desaparece e não surgem efeitos de renormalização do “gap” ou aquecimento local da rede que poderiam contribuir para reduzir o “gap” de energia e mascarar o efeito desejado. Contudo os efeitos da variação da intensidade de excitação não são geralmente criteriosamente considerados nas análises de $E_g(T)$.

Neste trabalho realizamos medidas de fotoluminescência no intervalo de temperatura de 8.5 – 100 K. As medidas foram realizadas de 3 em 3 K no intervalo de 12 a 30 K, de 4 em 4 K no intervalo de 30 a 54 K e 10 em 10 K no intervalo de 60 a 100 K, resultando em um total de 19 pontos experimentais. A densidade de pontos experimentais no estudo (19 pontos entre 8.5 – 100 K) é alta o suficiente para se obter um bom ajuste.

Neste capítulo apresentaremos os resultados experimentais obtidos neste trabalho como se segue: efeito da concentração de alumínio nas recombinações excitônicas dependentes da temperatura; fotoluminescência em função da temperatura e da potência de excitação; variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura a potência de 7.0 mW e os ajustes com os modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*).

5.2 EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE ALUMÍNIO NA DEPENDÊNCIA COM A TEMPERATURA DAS RECOMBINAÇÕES EXCITÔNICAS EM POÇOS QUÂNTICOS DE AlGaAs/GaAs

Nesta secção apresentamos os resultados experimentais da variação da energia do pico de PL com a temperatura em função da concentração de alumínio na barreira para baixas potências de excitação.

Na Figura 5.2 apresentamos os resultados de PL das amostras de AlGaAs/GaAs com diferentes concentrações alumínio a temperatura de 8.5 K e potência de 0.07 mW. Podemos observar dois comportamentos teoricamente bem conhecidos em heteroestruturas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs quando aumenta a concentração de alumínio na barreira: o deslocamento para maiores energias dos estados quantizados, o que induz o deslocamento observado da energia de transição excitônica e o aumento da largura de linha dos espectros.

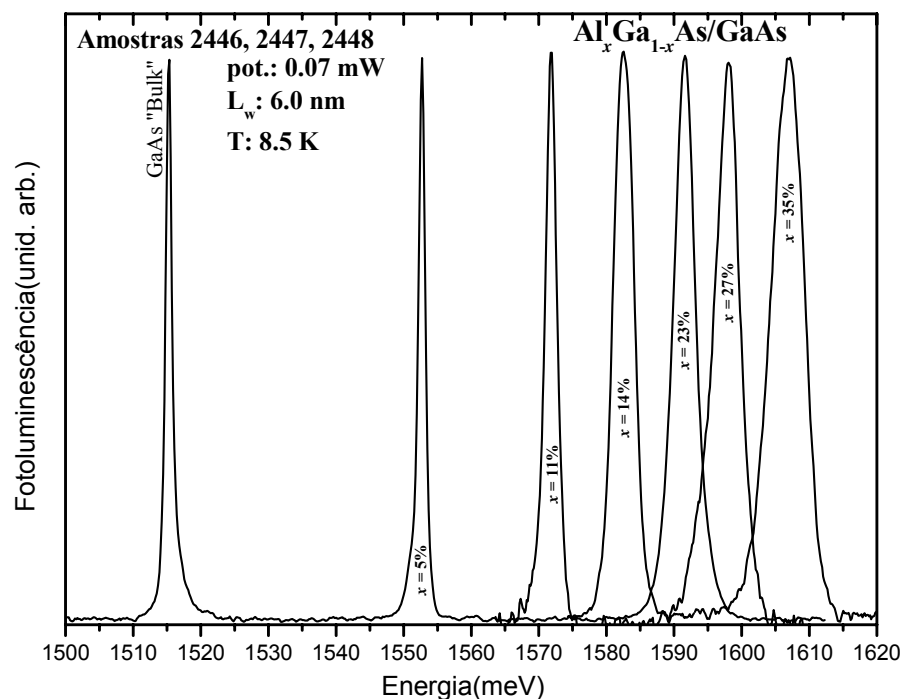


Figura 5.2 – Espectros de fotoluminescência obtidos para $T = 8.5$ K com as mesmas condições experimentais, largura de fenda $100 \mu\text{m}$, potência 0.07 mW. Os espectros estão normalizados.

Na Figura 5.3 mostramos a variação da energia do pico de fotoluminescência das transições excitônicas, n_1 - hh_1 , nos poços quânticos de AlGaAs/GaAs com a concentração de alumínio na barreira para potências de excitação de 0.07 e 7.0 mW, e valores calculados através da aproximação da função envelope. Os parâmetros utilizados para os cálculos estão na Tabela 2.1. A largura do poço utilizada para os cálculos que apresentou melhor ajuste com os dados experimentais é de $L_z = 50$ Å, portanto, inferior à largura nominal (60 Å). Os valores calculados usando a função envelope não consideram a energia de ligação excitônica (E_b). Considerando a energia de ligação excitônica, de acordo com o modelo de H. Matheiu *et al.*,^[5.37] em cálculo realizado por D. F. César^[5.38] podemos observar na Figura 5.3 a recombinação calculada e os dados experimentais.

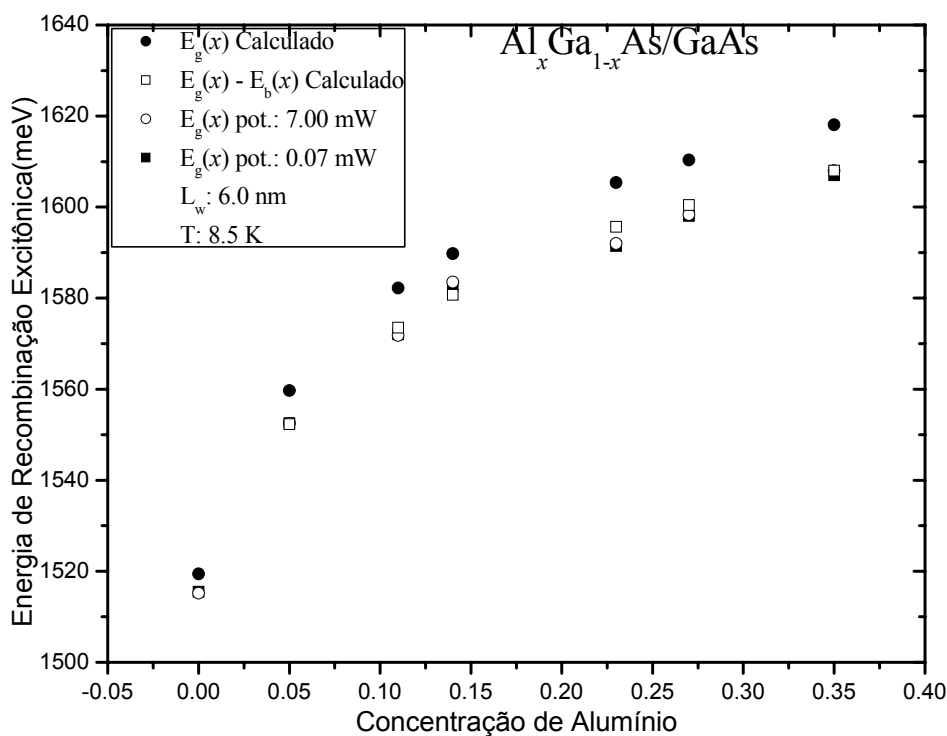


Figura 5.3 – Variação da energia da recombinação excitônica, n_1 - hh_1 , obtida por fotoluminescência em função da concentração de alumínio na barreira do poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs. Os quadrados pretos indicam potência de 0.07 mW (~ 0.16 W/cm²), os círculos vazios potência de 7.0 mW (~ 16 W/cm²), os círculos cheios valores calculados da recombinação e os quadrados vazios representam os valores calculados da recombinação subtraídos da energia de ligação excitônica.

O aumento da concentração de alumínio na barreira, faz com que a altura da barreira aumente e a energia de recombinação excitônica desloque para maiores energias. O

aumento da potência nestas condições resulta em um pequeno aumento na energia de recombinação, melhor observado para maiores concentrações de Al.

Apresentamos na Figura 5.4 a variação da largura da linha a meia altura (FWHM) com a concentração de alumínio na barreira em amostras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, para as potências de 0.07 mW ($\sim 0.16 \text{ W/cm}^2$) e 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$).

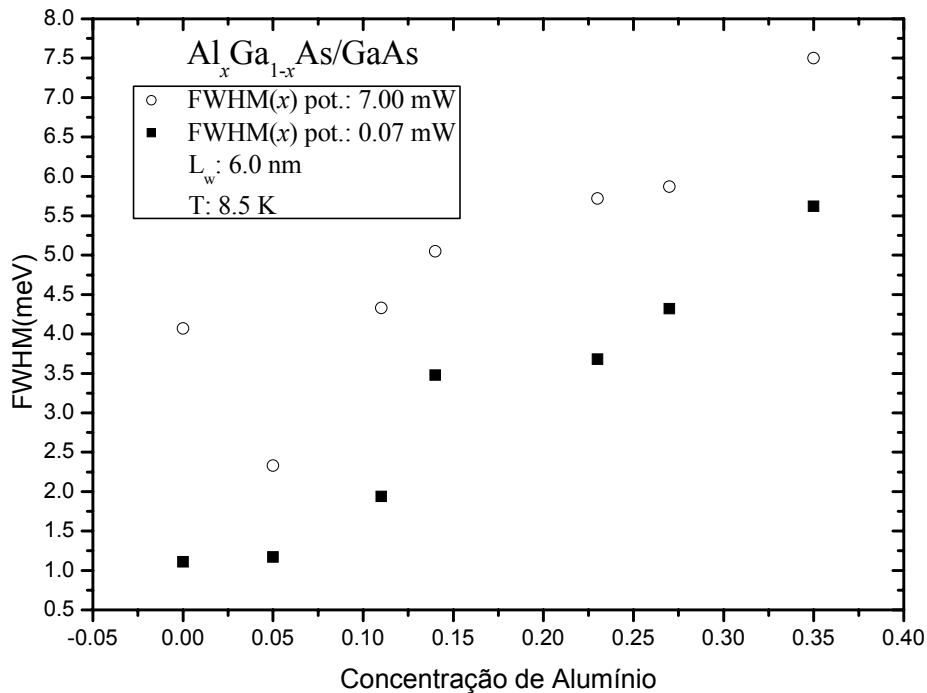


Figura 5.4 – FWHM dos espectros de fotoluminescência das transições $n_1\text{-}hh_1$ das amostras 2446 ($x_1 = 0.05$; $x_2 = 0.23$), 2447 ($x_1 = 0.11$; $x_2 = 0.27$), 2448 ($x_1 = 0.14$; $x_2 = 0.35$) (amostras com poços de mesma largura) em $T = 8.5 \text{ K}$ sob mesma potência (0.07 mW ($\sim 0.16 \text{ W/cm}^2$) quadrado e 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$) círculo vazio).

O pequeno valor da largura de linha a meia altura destas amostras de aproximadamente 1.17 meV, para o GaAs e para o poço com concentração de alumínio de 5% à baixa temperatura e a baixa potência de excitação, indica que as amostras são de boa qualidade.^[5.4,5..5]

O valor da FWHM(T) é dependente tanto da potência de excitação quanto da concentração de Al. A FWHM aumenta com o acréscimo de Al na barreira e com o aumento da potência de excitação. A largura de linha do GaAs “bulk” é fortemente dependente da potência de excitação, variando por um fator de aproximadamente 4, a $T = 8.5 \text{ K}$, entre 0.07 mW e 7.0 mW.

O comportamento observado da FWHM com a concentração de Al na barreira do poço quântico pode ser explicado usando o modelo proposto por Singh e Bajaj.^[5.24] A variação da largura de linha em função da concentração de Al presente na liga AlGaAs que compõe a barreira, mostrada na Figura 5.4, possui contribuições da desordem de interface e da desordem composicional da liga ternária. Uma estimativa da contribuição de cada mecanismo específico para a largura de linha, embora bastante discutida na literatura,^[5.24] é problemática. Isto se deve ao fato que o volume do éxciton, uma quantidade usada no cálculo da largura de linha excitônica de ligas, não é uma quantidade bem definida, o que leva a diferentes aproximações para o cálculo da largura de linha excitônica em ligas semicondutoras.^[5.25] Além disso, outro problema é estimar o tamanho das ilhas de flutuação das larguras dos poços, que é um fato importante no cálculo. Deste modo seria necessário aprofundar esta discussão, o que foge ao escopo de nosso trabalho. O importante neste momento é caracterizar a relevância da variação da composição química da liga da barreira para o processo da energia de recombinação excitônica com a temperatura.

5.3 FOTOLUMINESCÊNCIA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E DA POTÊNCIA

As medidas de fotoluminescências com variação da temperatura (8.5 a 100 K) foram realizadas a potências diferentes, definidas em um intervalo que permitisse verificar qual é o valor da potência de excitação suficiente para blindar os efeitos das flutuações do potencial de confinamento nos poços quânticos sem aquecer localmente a rede ou provocar a renormalização do “gap” de energia.

Na Figura 5.5 apresentamos os espectros de fotoluminescência da amostra 2446 – GaAs “bulk” da camada “buffer” e poços com concentrações de alumínio na barreira de $x = 0.05$ e $x = 0.23$ – com variação da temperatura de 8.5 a 100 K (5.5A) e 120 a 300 K (5.5C), respectivamente, obtida para potência de excitação de 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$). As outras amostras apresentaram comportamento semelhante.

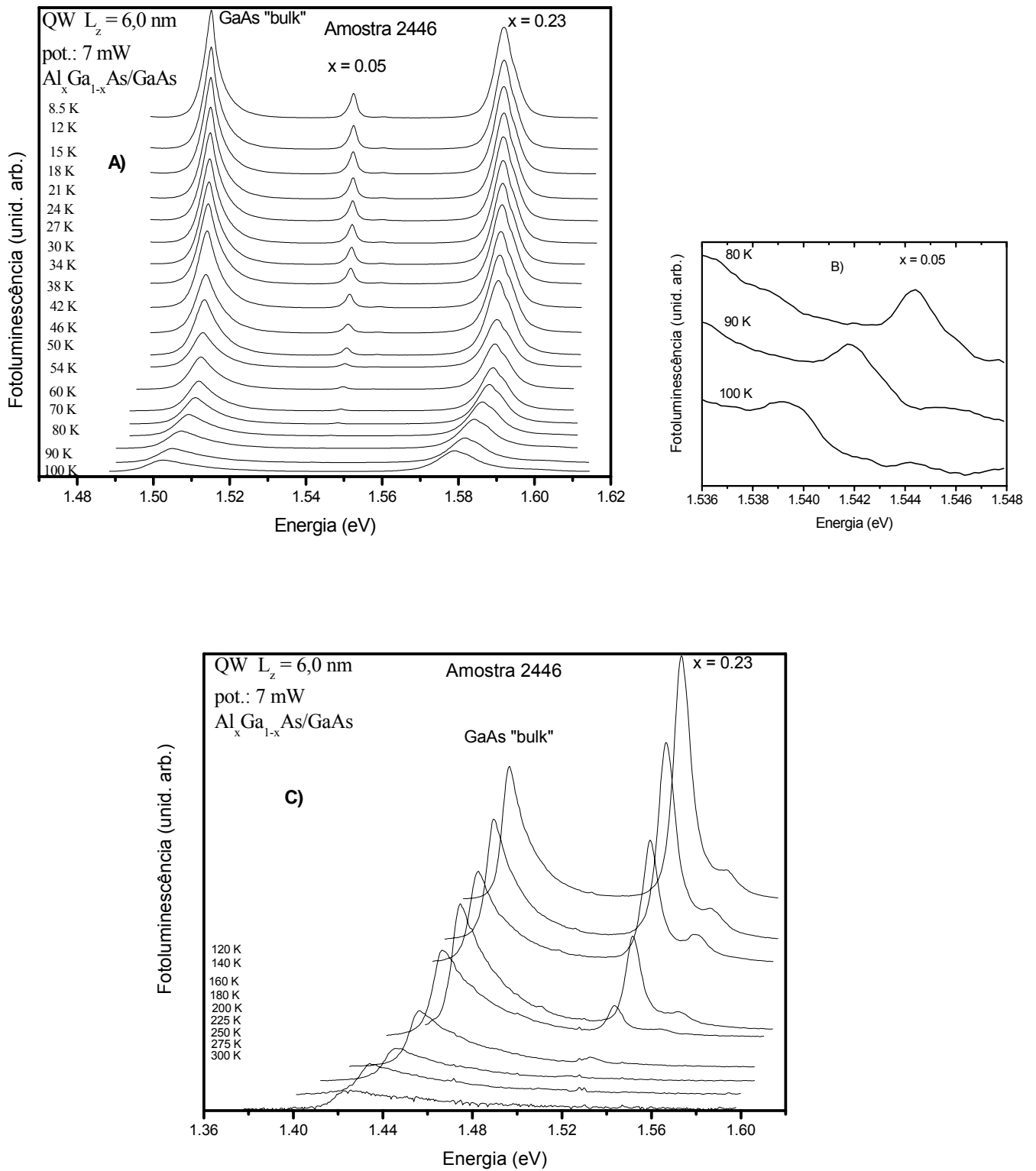


Figura 5.5 – Espectros de fotoluminescência com variação da temperatura no intervalo de A) 8,5 a 100 K, C) 120 a 300 K a potência de 7,0 mW na amostra 2446. Em B) mostramos uma ampliação dos espectros de fotoluminescência para o poço com $x = 0,05$ na barreira para $T = 80$ K, 90 K e 100 K.

Nas Figuras 5.6 a 5.9 apresentamos os espectros de fotoluminescência da amostra 2448 – poços com concentrações de alumínio na barreira de $x = 0.14$ e $x = 0.35$ – com variação da temperatura de 8.5 a 100 K obtida para diferentes potências de excitação: 0.007 mW (~ 0.016 W/cm²), 0.07 mW (~ 0.16 W/cm²), 0.7 mW (~ 1.6 W/cm²) e 7.0 mW (~ 16 W/cm²), respectivamente. Escolhemos a amostra 2448 por melhor evidenciar os efeitos da variação da potência de excitação sobre os espectros de fotoluminescência. As outras amostras apresentam um padrão semelhante. Na amostra 2448 foram realizadas ainda medidas com uma potência de excitação mais alta de aproximadamente 70 mW (~ 160 W/cm²). Verificamos deste modo qual o efeito provocado pelo aquecimento local da rede e/ou a renormalização do “gap” de energia. Utilizamos filtros de densidade neutra para abaixar a potência de excitação sobre a amostra. A fenda do monocromador foi mantida em 100 μ m para todas as potências.

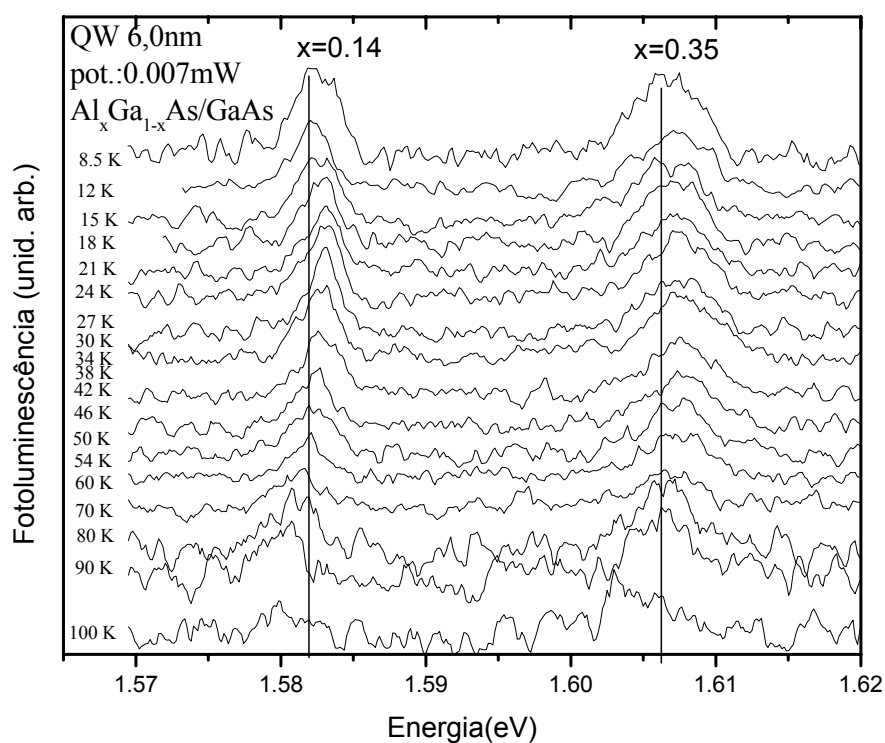


Figura 5.6 – Espectros de fotoluminescência com variação da temperatura de 8.5 K a 100 K a potência de 0.007 mW na amostra 2448.

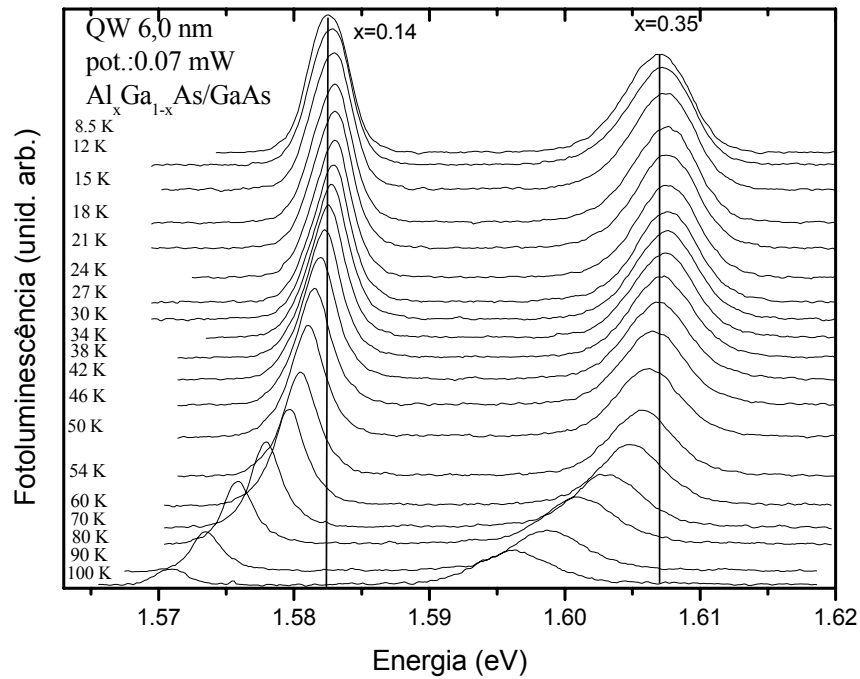


Figura 5.7 – Espectros de fotoluminescência com variação da temperatura de 8.5 K a 100 K a potência de 0.07 mW na amostra 2448.

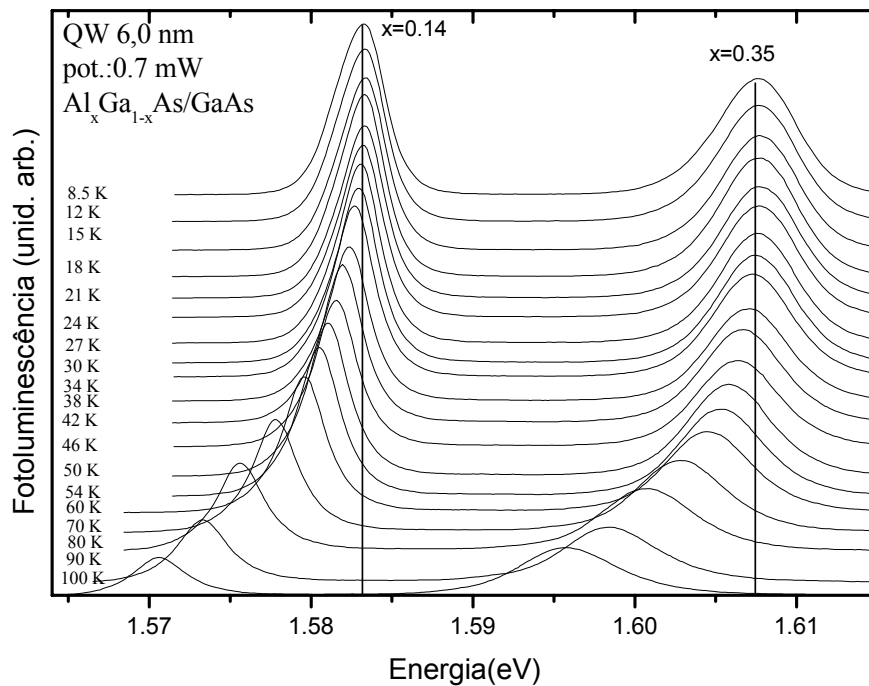


Figura 5.8 – Espectros de fotoluminescência com variação da temperatura de 8.5 K a 100 K a potência de 0.7 mW na amostra 2448.

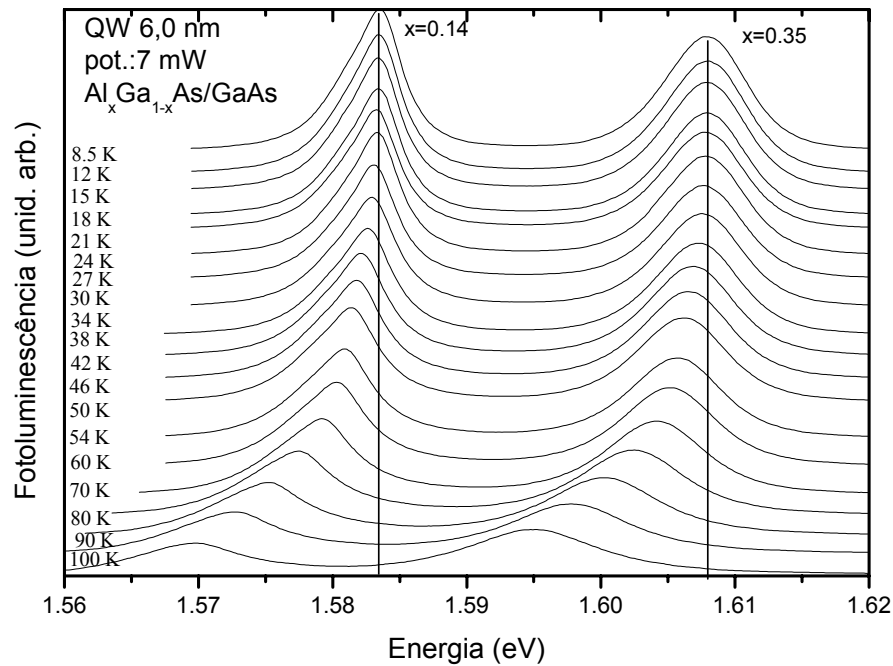


Figura 5.9 – Espectros de fotoluminescência com variação da temperatura de 8.5 K a 100 K a potência de 7.0 mW na amostra 2448.

Nas Figuras 5.10 a 5.16 mostramos a variação do pico principal de PL, referente à recombinação excitônica de buraco pesado ($n_1\text{-hh}_1$), em função da temperatura e potência de excitação, para todas as amostras. A intensidade de fotoluminescência do GaAs “bulk” a potência de 0.007 mW não foi suficiente para obtermos a variação da energia do pico de PL com a temperatura no intervalo de temperatura considerado.

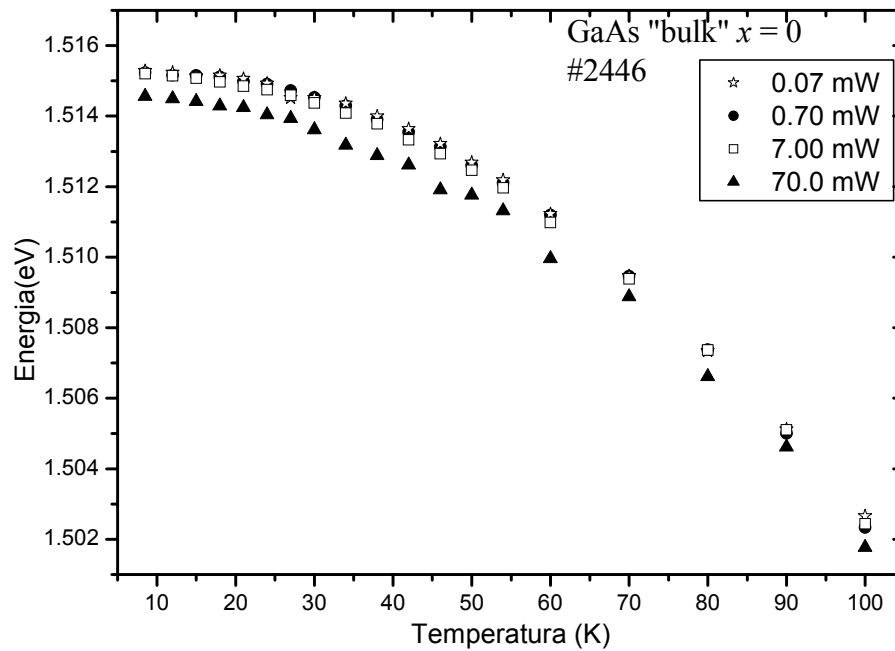


Figura 5.10 – Posição do pico da transição éxciton – banda de valência em função da temperatura do GaAs "bulk" na amostra 2446.

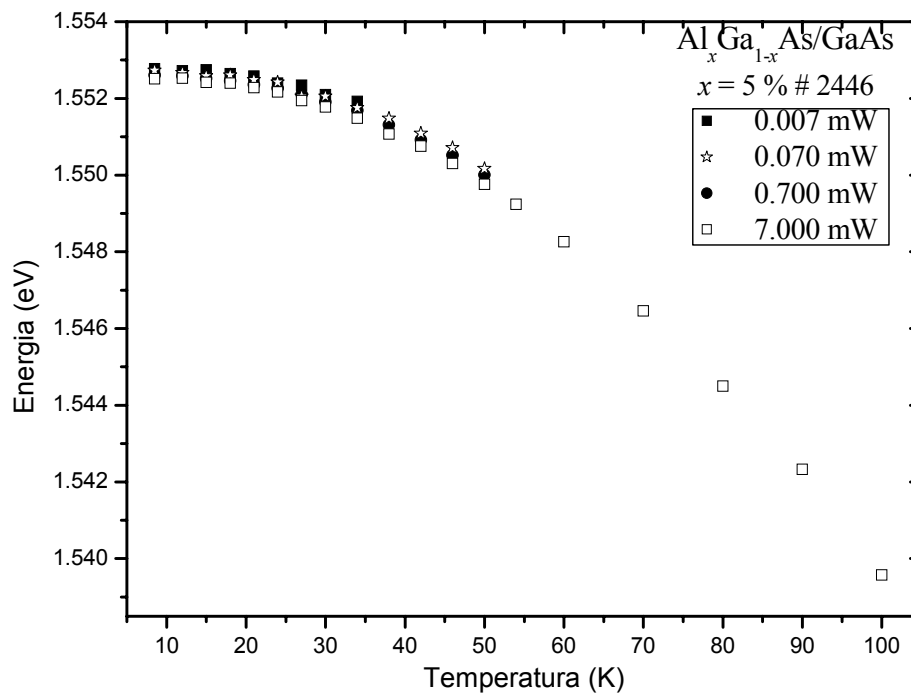


Figura 5.11 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 5\%$ em função da temperatura, na amostra 2446.

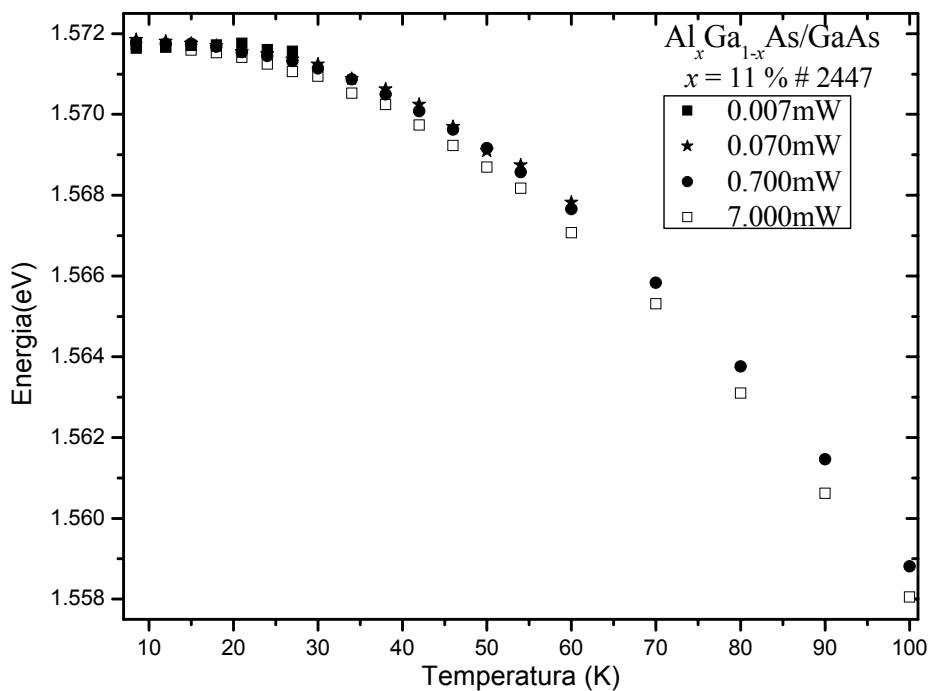


Figura 5.12 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs com $x = 11\%$ em função da temperatura, na amostra 2447.

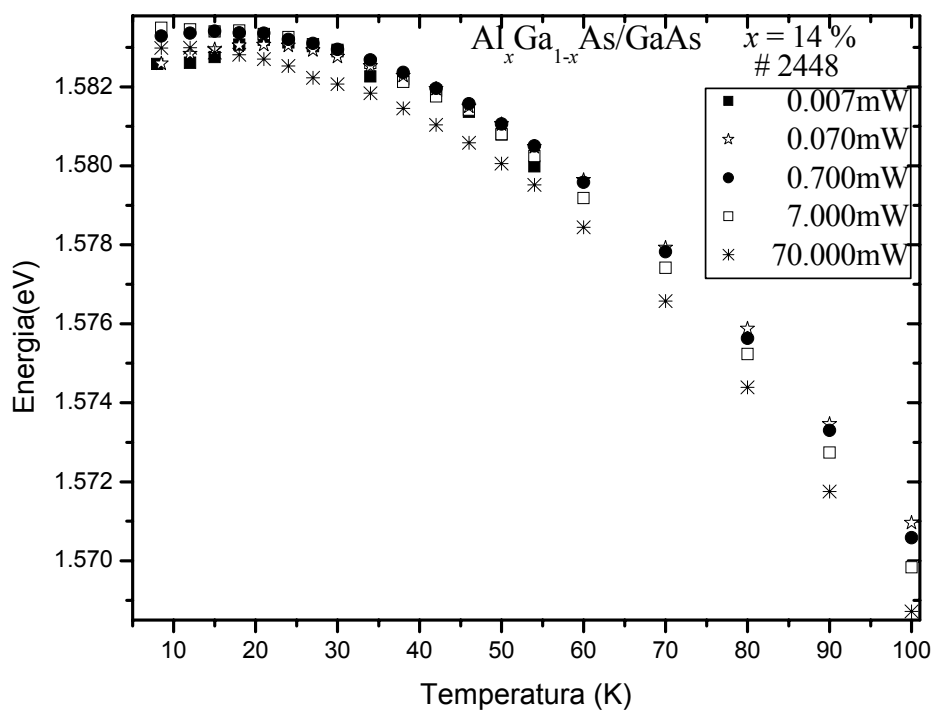


Figura 5.13 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs com $x = 14\%$ em função da temperatura, na amostra 2448.

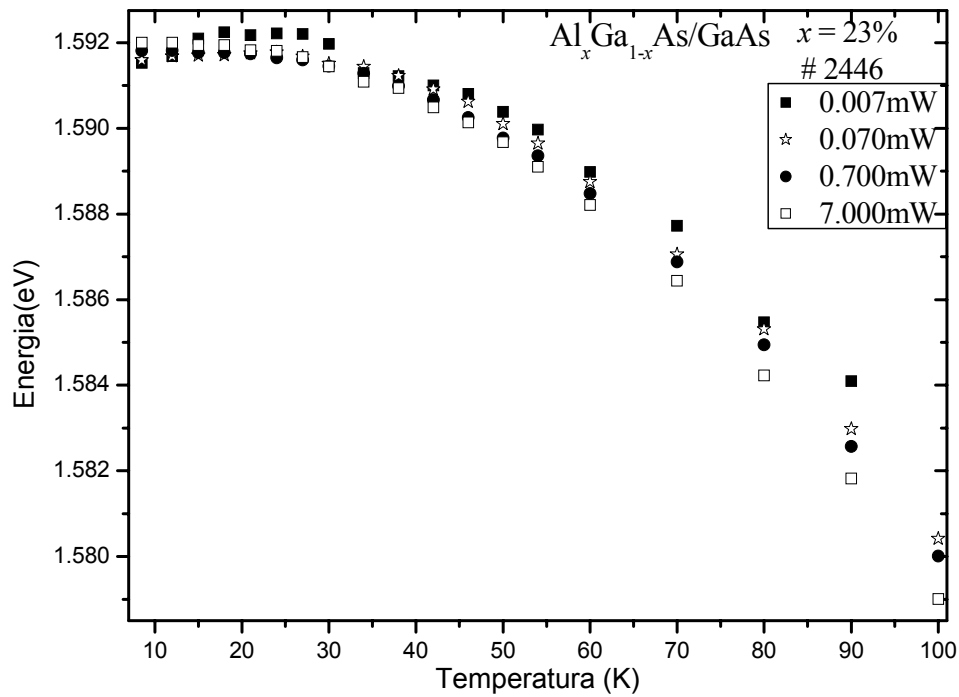


Figura 5.14 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs com $x = 23\%$ em função da temperatura, na amostra 2446.

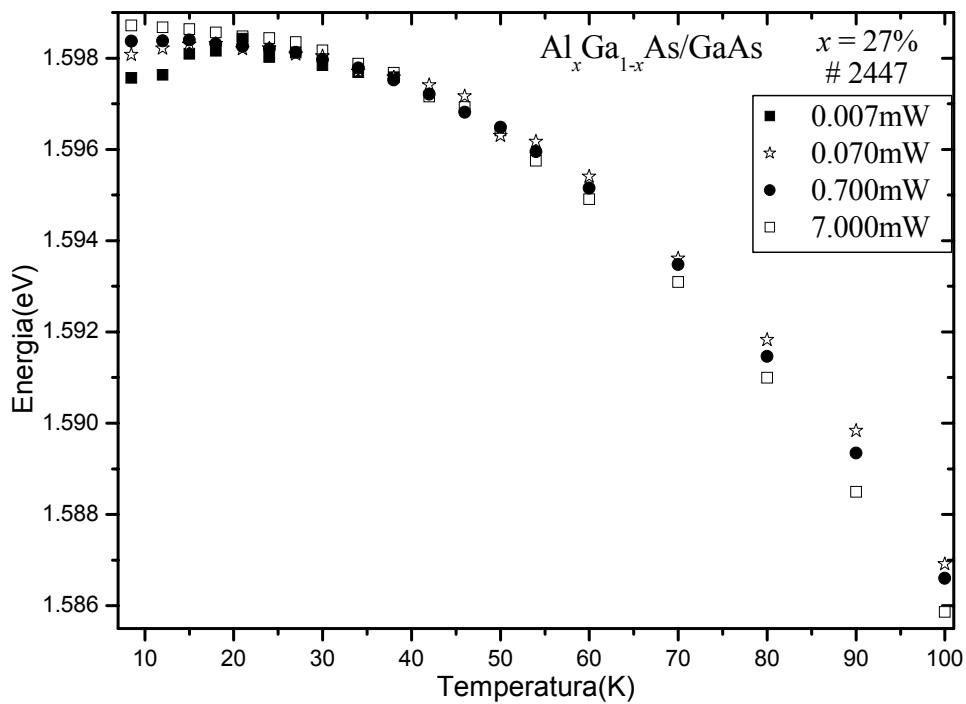


Figura 5.15 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de Al_xGa_{1-x}As/GaAs com $x = 27\%$ em função da temperatura, na amostra 2447.

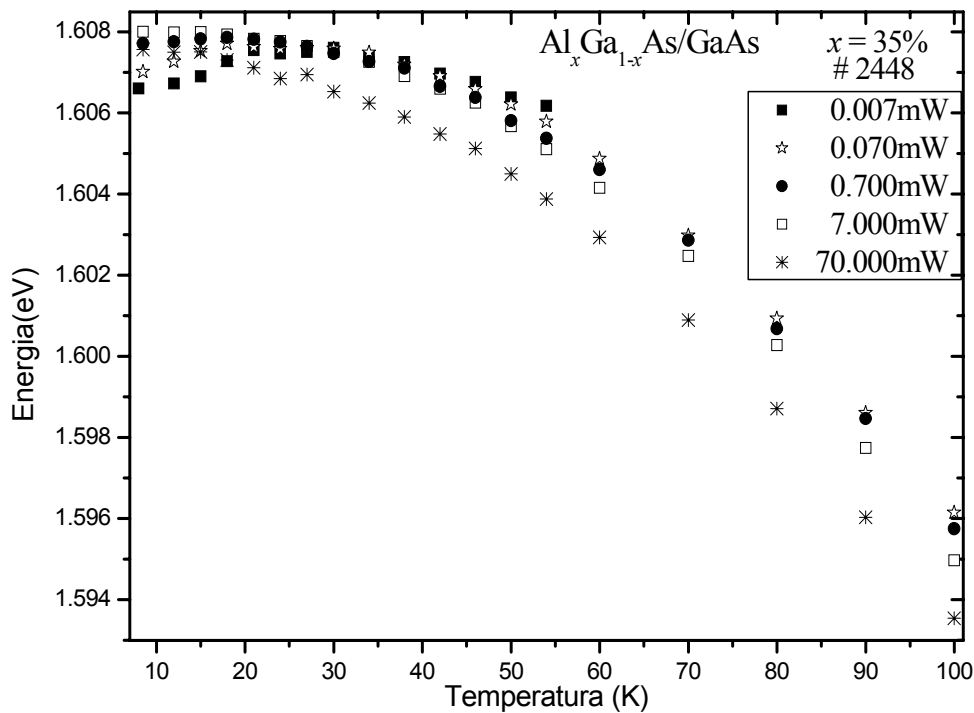


Figura 5.16 – Posição do pico da transição éxciton - buraco pesado no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 35\%$ em função da temperatura, na amostra 2448.

Verifica-se que sob regime de baixa excitação (0.007 mW ($\sim 0.016 \text{ W/cm}^2$); 0.07 mW ($\sim 0.16 \text{ W/cm}^2$) e 0.7 mW ($\sim 1.6 \text{ W/cm}^2$) a energia de recombinação excitônica em função da temperatura apresenta um comportamento conhecido como “blue/redshift behavior”, isto é, a energia do pico do espectro de PL aumenta e depois diminui com o aumento gradual da temperatura. Verificamos que 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$) é uma potência adequada para blindar este efeito em todas as amostras. Aumentando a potência para 70 mW ($\sim 160 \text{ W/cm}^2$) na amostra 2448 observamos a renormalização do “gap” de energia e/ou o aquecimento local da rede devido à alta potência.

A variação do “gap” de energia ou da recombinação excitônica com a temperatura no intervalo de $8.5 - 100 \text{ K}$ ($E_g(8.5) - E_g(100) = \Delta E_g$) a 7.0 mW ($\sim 16 \text{ W/cm}^2$) em nossas amostras forneceram: para $x = 0$, $\Delta E_g = 12.77 \text{ meV}$; $x = 0.05$, $\Delta E_g = 12.94 \text{ meV}$; $x = 0.11$, $\Delta E_g = 12.97 \text{ meV}$; $x = 0.14$, $\Delta E_g = 13.67 \text{ meV}$; $x = 0.23$, $\Delta E_g = 12.99 \text{ meV}$; $x = 0.27$, $\Delta E_g = 11.77 \text{ meV}$; $x = 0.35$, $\Delta E_g = 13.04 \text{ meV}$. Estes resultados são similares aos obtidos por Grilli *et al.*,^[5.5] para o GaAs no intervalo de 2 a 100 K , com potência de excitação de 0.1 W/cm^2 que é de $\sim 13 \text{ meV}$. Isto nos permite inferir que o decréscimo em bloco da curva de

$E_g(T)$ a 70 mW ($\sim 160 \text{ W/cm}^2$) em comparação dos outros resultados a potências menores, seja possivelmente devido ao efeito de renormalização do “gap” de energia. Uma discussão mais sistemática destes efeitos será realizada em um futuro trabalho.

5.4 VARIAÇÃO DA ENERGIA DE RECOMBINAÇÃO EXCITÔNICA COM A TEMPERATURA A POTÊNCIA DE 7.0 mW (16 W/cm²)

A variação da energia de recombinação excitônica em função da temperatura (8.5 – 100 K), sob a mesma potência de excitação 7.0 mW (16 W/cm²) para todas as concentrações de alumínio nos poços de AlGaAs/GaAs é mostrada na Figura 5.17.

Os quadrados cheios estão representando a concentração de $x = 0\%$ (GaAs “bulk”); quadrados vazios, $x = 5\%$; círculos cheios, $x = 11\%$; círculos vazios, $x = 14\%$; triângulos para cima cheios, $x = 23\%$; triângulos para cima vazios, $x = 27\%$; triângulos para baixo cheios, $x = 35\%$.

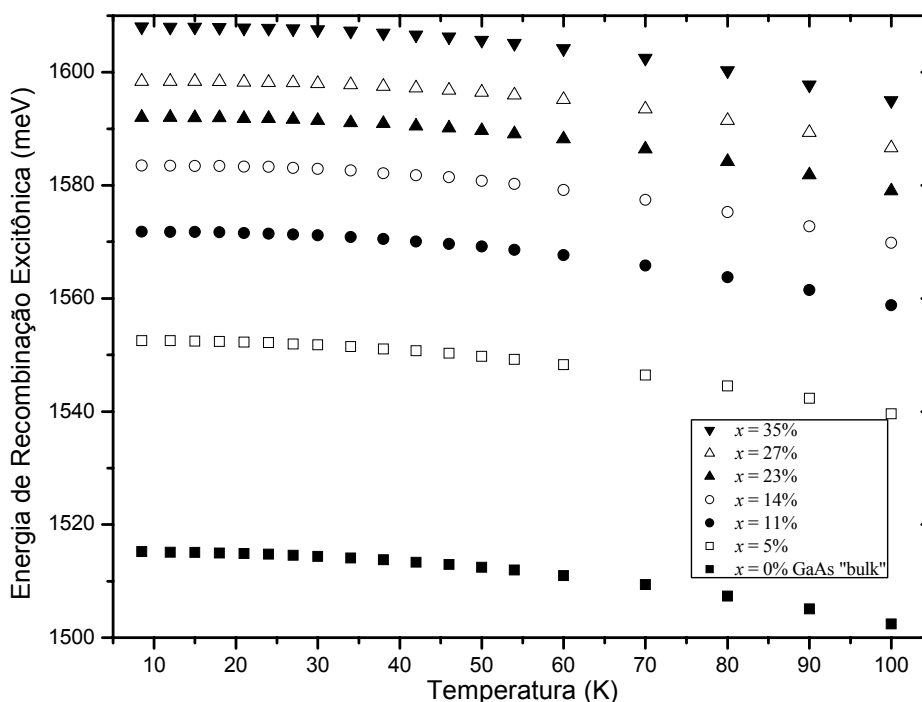


Figura 5.17 – Variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para todas as concentrações de alumínio nas barreiras dos poços de AlGaAs/GaAs, a 7.0 mW.

Os ajustes das curvas mostradas na Figura 5.17, com os modelos de Viña e Pässler, dadas pelas Equações 3.7 e 3.11 reapresentadas abaixo, são mostrados nas Figuras 5.18 a 5.24.

$$E_g(T) = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \quad (3.7)$$

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha\Theta_p}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta_p}\right)^p} - 1 \right] \quad (3.11)$$

Como vimos na Figura 5.10 as medidas de fotoluminescência do GaAs “bulk” da camada “buffer” da amostra #2446 não apresentam o comportamento denominado “blue-shift” por não haver flutuação de potencial. Deste modo, podemos ajustar a variação da transição excitônica com a temperatura com os modelos de Viña e Pässler para as três potências de excitação em que foram feitas as medidas de fotoluminescência. A Figura 5.18A, 5.18B e 5.18C mostra os ajustes de $E_g(T)$ no GaAs “bulk” para as potências 0.07 mW (~ 0.16 W/cm²), 0.7 mW (~ 1.6 W/cm²) e 7.0 mW (~ 16 W/cm²), respectivamente. O modelo de Pässler *tipo- ρ* será apresentado somente em algumas amostras, porém verificamos que seus resultados apresentam um padrão semelhante para as outras amostras. A baixas temperaturas ele apresenta uma curvatura mais acentuada, um pouco superior aos resultados experimentais. Para facilitar a análise reapresentamos a equação de Pässler *tipo- ρ* abaixo:

$$E(T) = E(0) - \frac{\alpha\Theta_0}{2} \left[\frac{\rho}{2} \left(\sqrt[4]{1 + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{4T}{\Theta_0}\right)^2 + \left(\frac{4T}{\Theta_0}\right)^4} - 1 \right) + (1-\rho) \left(\coth\left(\frac{\Theta_0}{2T}\right) - 1 \right) \right] \quad (3.13).$$

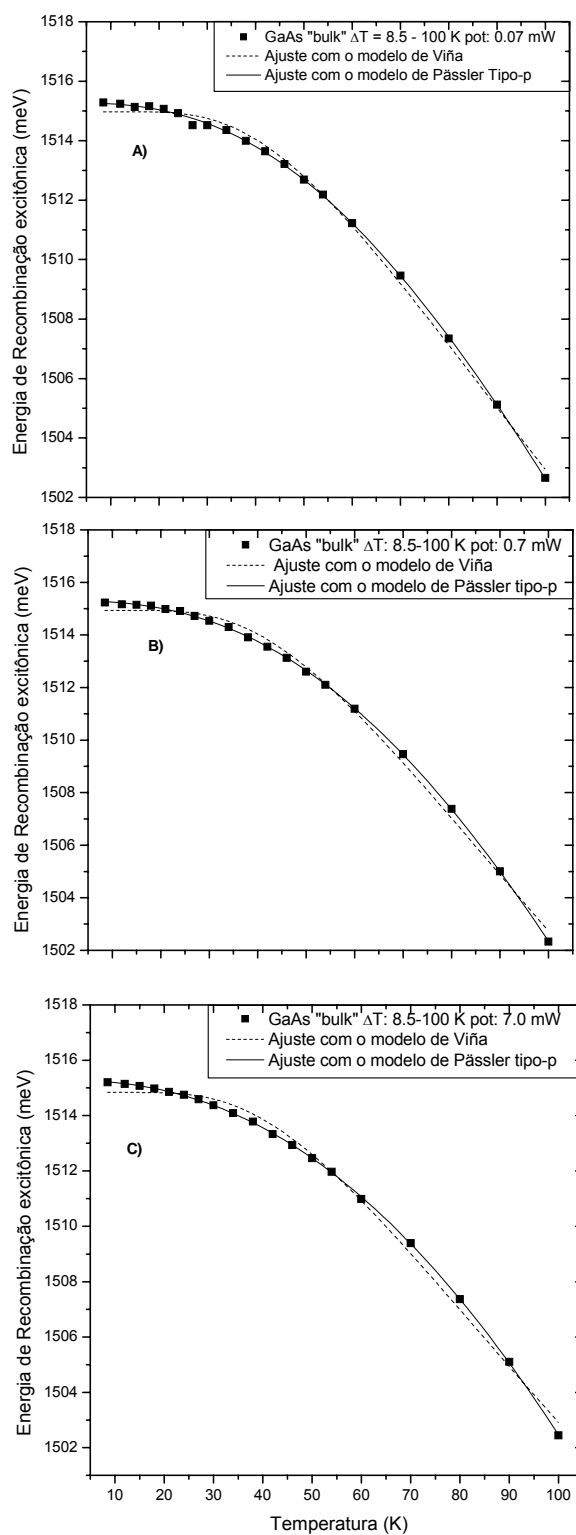


Figura 5.18 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no GaAs “bulk” no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p* e a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña. A) Medidas realizadas com potência de excitação de 0.07 mW, B) com potência de excitação de 0.7 mW e C) com potência de excitação de 7.0 mW.

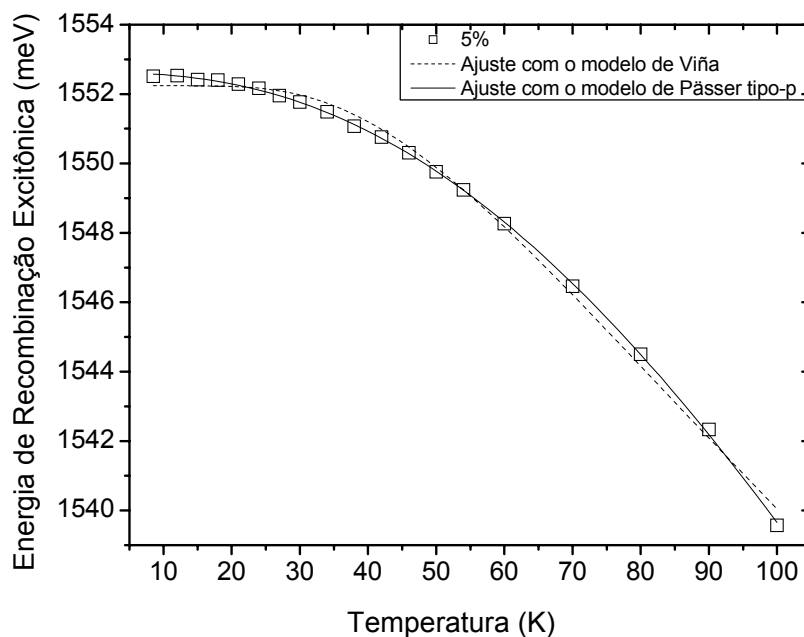


Figura 5.19 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 5\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p* e a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña.

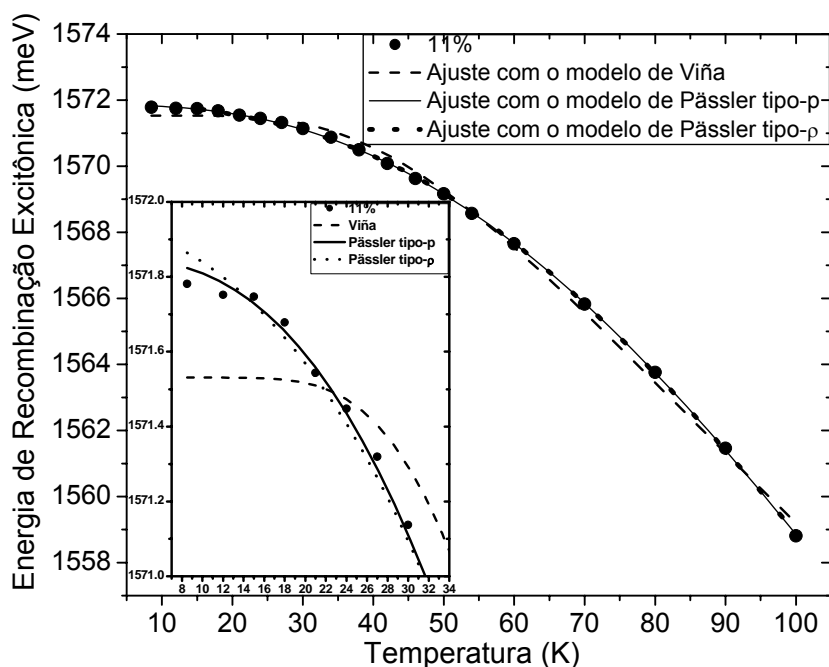


Figura 5.20 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 11\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p*, a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña e a linha pontilhada o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p*.

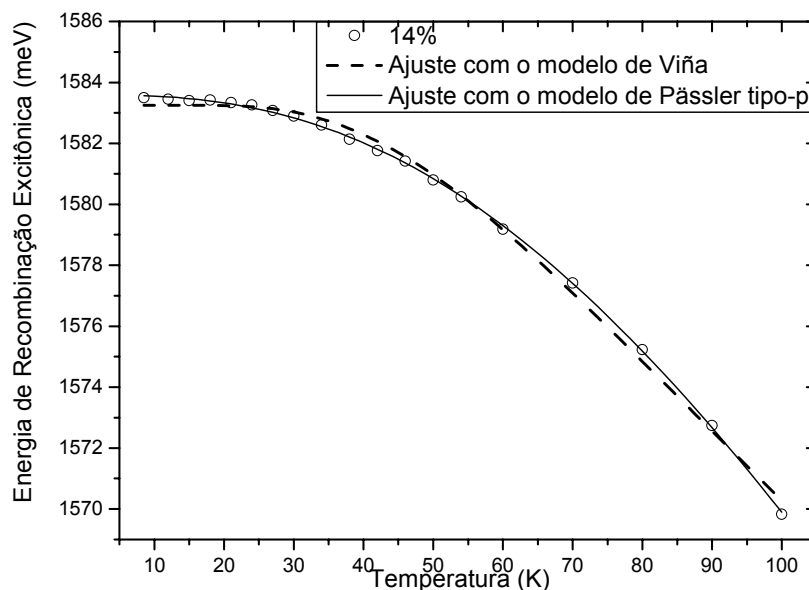


Figura 5.21 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 14\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p* e a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña.

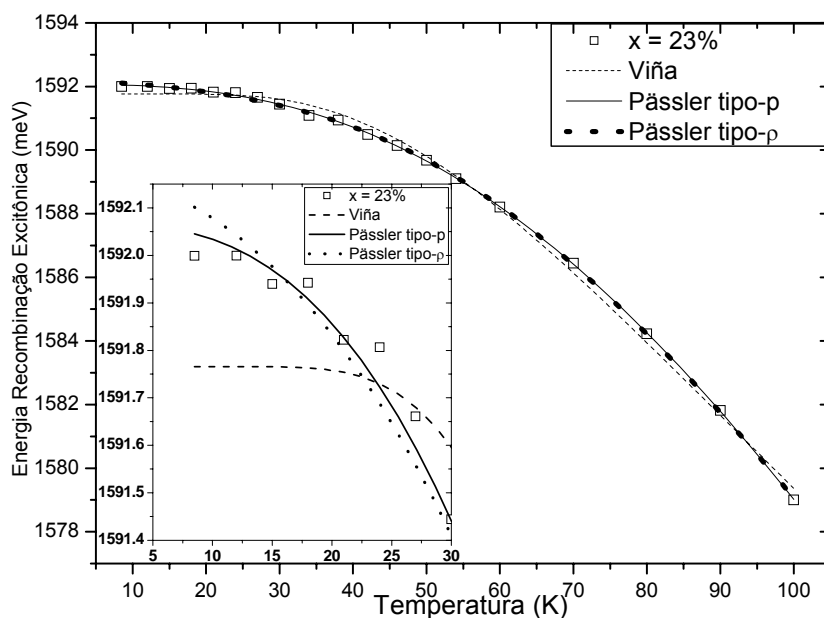


Figura 5.22 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 23\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p*, a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña e a linha pontilhada o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p*.

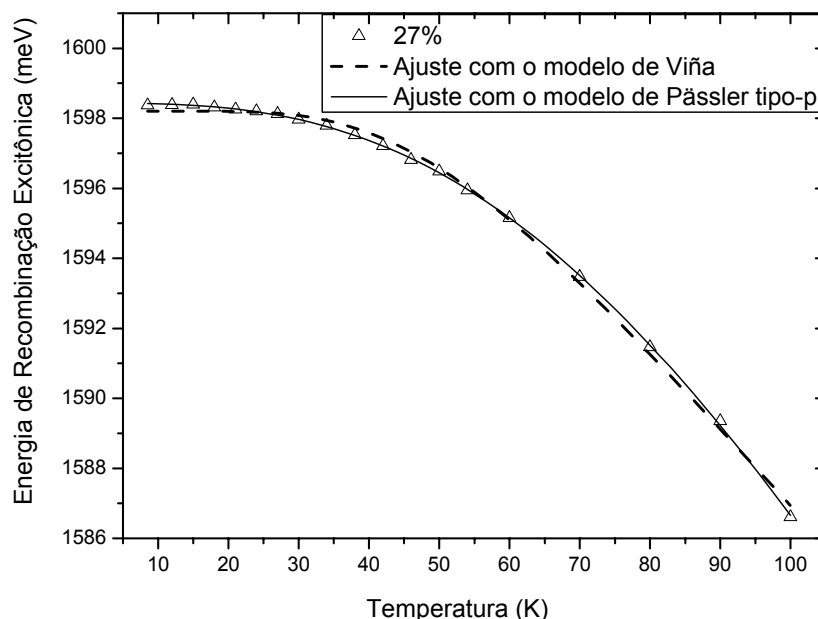


Figura 5.23 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura no poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 27\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p* e a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña.

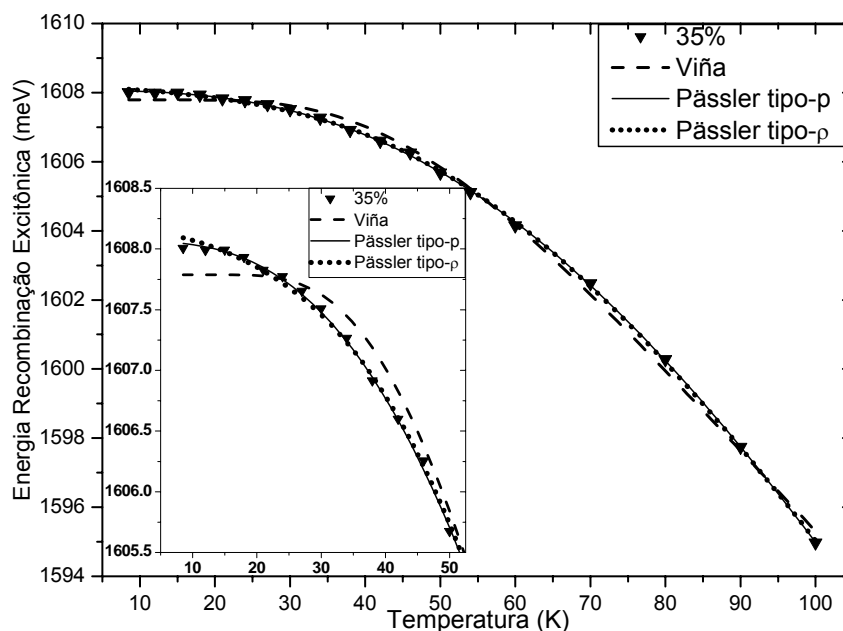


Figura 5.24 – Variação da recombinação excitônica com a temperatura para poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x = 35\%$ no intervalo de 8.5 – 100 K. Os quadrados abertos representam os dados experimentais, a linha sólida o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-p*, a linha tracejada o ajuste com o modelo de Viña e a linha pontilhada o ajuste com o modelo de Pässler *tipo-ρ*. Uma ampliação da região de baixas temperaturas, 8.5 a 50 K, é mostrada em detalhe.

Verificam-se em todas as amostras as diferenças entre os ajustes realizados pelos modelos de Viña e os dois de Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*). O modelo de Pässler *tipo-p* ajusta melhor que o modelo de Pässler *tipo-ρ* em todos os casos e o modelo de Viña apresenta o comportamento de platô a baixas temperaturas, portanto o modelo de ajuste que menos representa o comportamento experimental.

Nas Tabelas 5.1 e 5.2 apresentamos os resultados dos ajustes de $E_g(T)$ das medidas do GaAs “bulk” mostrados na Figura 5.18 com os modelos de Viña e de Pässler *tipo-p*, respectivamente, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K para várias potências de excitação. Na Tabela 5.3 apresentamos os resultados dos ajustes de $E_g(T)$ do GaAs “bulk” com o modelo de Pässler *tipo-ρ*, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K para várias potências de excitação.

Tabela 5.1 – Parâmetros de ajuste do modelo de Viña, para a variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura em várias potências no GaAs “bulk”, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K.

Potência (mW)	E_B (meV)	a_B (meV)	Θ_B (K)	Θ_B (meV)	S^2 (10^{-2}meV^2)
0.07	1535.6±1.5	20.6±1.5	146±5	12.6±0.5	2.53
0.70	1549.4±2.4	34.5±2.4	173±6	12.4±0.4	2.98
7.0	1546.6±2.4	31.7±2.4	167±7	12.0±0.5	7.75

Tabela 5.2 – Parâmetros de ajuste do modelo de Pässler *tipo-p*, para a variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura em várias potências no GaAs “bulk”, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K.

Potência (mW)	E_g (meV)	α (meV/K)	Θ_p (K)	Θ_p (meV)	p	S^2 (10^{-2}meV^2)
0.07	1515.28±0.04	0.34±0.03	163±20	14±2	2.68±0.12	5.12E-07
0.70	1515.30±0.02	0.47±0.04	231±22	20±2	2.48±0.05	9.56E-08
7.0	1515.27±0.02	0.78±0.24	432±131	37±11	2.24±0.04	0.099

Tabela 5.3 – Parâmetros de ajuste do modelo de Pässler *tipo-ρ*, para a variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura ($\Delta T = 8.5 - 100$ K) para várias potências de excitação no GaAs “bulk”.

Potência (mW)	E_0 (meV)	α (meV/K)	Θ_0 (K)	Θ_0 (meV)	ρ	S^2 (10^{-2}meV^2)
0.07	1515.37±0.04	0.34±0.01	222±14	19±1	0.35±0.03	4.458E-07
0.70	1515.39±0.03	0.39±0.02	257±14	22±1	0.40±0.02	3.16E-07
7.0	1515.34±0.02	0.42±0.23	305±20	26±2	0.49±0.02	0.232

Nas Tabelas 5.4 e 5.5 apresentamos os resultados dos ajustes da variação da recombinação excitônica de buraco pesado em função da temperatura $E_g(T)$ com os modelos de Viña e de Pässler, respectivamente, para várias concentrações de Al no intervalo de temperatura de 8.5 a 300 K a 7.0 mW.

Tabela 5.4 – Parâmetros de ajuste do modelo de Viña da variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para várias concentrações de Al, no intervalo de temperatura 8.5 – 300 K e potência a 7.0 mW.

Viña x	E_B (meV)	a_B (meV)	Θ_B (K)	Θ_B (meV)	S^2 (meV ²)
0.00	1565±1	51±2	226±5	19.6±0.5	3.97
0.23	1636±2	45±2	212±6	18.3±0.5	2.40
0.27	1652±1	55±1	236±3	20.3±0.3	1.60
0.35	1661±1	54±2	229±4	19.7±0.4	2.84

Tabela 5.5 – Parâmetros de ajuste do modelo de Pässler *tipo-p* da variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para várias concentrações de Al, no intervalo de temperatura 8.5 – 300 K e potência a 7.0 mW.

Pässler p x	E_0 (meV)	α (meV/K)	Θ_p (K)	Θ_p (meV)	p	S^2 (10 ⁻² meV ²)
0.00	1515.16±0.08	0.47±0.01	234±7	20.2±0.6	2.47±0.05	3.8
0.23	1592.18±0.05	0.48±0.01	238±8	20.5±0.7	2.47±0.04	1.6
0.27	1598.48±0.08	0.46±0.01	210±5	18.1±0.4	2.82±0.06	4.6
0.35	1608.18±0.05	0.49±0.01	226±3	19.5±0.3	2.56±0.03	1.4

Para as concentrações de Al (5%; 11% e 14%) o sinal de fotoluminescência não chegou a 300 K com uma intensidade suficiente para fazermos uma medida confiável.

Nas Tabelas 5.6 e 5.7 apresentamos os resultados dos ajustes da variação da recombinação excitônica em função da temperatura mostrados anteriormente nas Figuras 5.18 – 5.24, para o modelo da Viña e Pässler *tipo-p*, respectivamente, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K. Na Tabela 5.8 apresentamos os resultados dos ajustes de $E_g(T)$ do GaAs “bulk” com o modelo de Pässler *tipo-ρ*, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K para várias concentrações de Al.

Tabela 5.6 – Parâmetros de ajuste do modelo de Viña da variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para várias concentrações de Al, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K e potência a 7.0 mW.

Viña x	E_B (meV)	a_B (meV)	Θ_B (K)	Θ_B (meV)	S^2 (10^{-2} meV^2)
0.00	1533.2±1.5	18.3±1.5	138.8±6.0	12.0±0.5	3.930
0.05	1570.4±1.2	18.0±1.3	136.2±5.0	11.7±0.4	2.891
0.11	1591.4±1.1	19.8±1.2	142.5±4.3	12.3±0.4	2.021
0.14	1605.5±1.4	22.1±1.5	147.2±4.9	12.7±0.4	2.831
0.23	1616.6±1.7	24.8±1.7	159.8±5.3	13.8±0.5	2.738
0.27	1624.1±1.6	25.8±1.6	171.0±4.9	14.7±0.4	1.786
0.35	1633.5±1.6	25.6±1.6	162.0±4.7	14.0±0.4	2.181

Tabela 5.7 – Parâmetros de ajuste do modelo de Pässler *tipo-p* da variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para várias concentrações de Al, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K e potência a 7.0 mW.

Pässler x	E_g (meV)	α (meV/K)	Θ_p (K)	Θ_p (meV)	p	S^2 (10^{-2} meV^2)
0.00	1515.27 ±0.02	0.78 ±0.24	432 ±131	37±11	2.24 ±0.04	0.099
0.05	1552.62 ±0.04	0.41 ±0.06	213 ±36	18±3	2.41 ±0.09	0.345
0.11	1571.85 ±0.02	0.36 ±0.02	170 ±10	15±1	2.63 ±0.05	0.105
0.14	1583.60 ±0.04	0.43 ±0.06	193 ±28	17±3	2.60 ±0.11	0.517
0.23	1592.07 ±0.03	0.45 ±0.04	199 ±20	17±2	2.71 ±0.08	0.240
0.27	1598.43 ±0.02	0.39 ±0.03	182 ±15	16±1	2.92 ±0.09	0.222
0.35	1608.06 ±0.02	0.41 ±0.03	180 ±13	16±1	2.82 ±0.08	0.211

Tabela 5.8 – Parâmetros de ajuste do modelo de Pässler do *tipo-ρ* para a variação da energia de recombinação excitônica com a temperatura para várias concentrações de Al, no intervalo de temperatura 8.5 – 100 K e potência a 7.0 mW.

Pässler ρ x	E_0 (meV)	α (meV/K)	Θ_0 (K)	Θ_0 (meV)	ρ	S^2 (10^{-2} meV^2)
0.00	1515.34±0.02	0.42±0.03	304±20	26±2	0.49±0.02	0.232
0.05	1552.70±0.04	0.35±0.02	242±20	20±2	0.44±0.04	0.547
0.11	1571.93±0.03	0.34±0.01	218±10	19±1	0.35±0.03	0.276
0.14	1583.69±0.06	0.38±0.02	230±18	20±2	0.34±0.04	0.918
0.23	1592.16±0.04	0.41±0.02	246±13	21±1	0.30±0.02	0.453
0.27	1598.51±0.04	0.38±0.02	238±11	21±1	0.23±0.02	0.393
0.35	1608.15±0.04	0.40±0.02	232±11	20±1	0.27±0.02	0.421

Em todas as tabelas apresentamos o valor do ajuste de mínimo-quadrado, variância (S^2), que é comumente usado para comparar a aplicabilidade dos modelos de ajuste de Viña e Pässler. Para isto é usada a expressão:

$$S^2 = \left(\frac{1}{n-m} \right) \sum_{i=1}^n (E_{gi}^{exp} - E_{gi}^{ajust})^2 \quad (5.1)$$

onde o sobrescrito “*exp*” indica valores experimentais e “*ajust*” valores calculados de E_g , para o i^{th} ponto experimental. $(n - m)$ é o número de graus de liberdade restante após o ajuste de n pontos de experimentais com m parâmetro variáveis na função de ajuste.

6 DISCUSSÃO

6.1 DISCUSSÃO SOBRE O EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE ALUMÍNIO NAS TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS DEPENDENTES DA TEMPERATURA PARA BAIXAS POTÊNCIAS DE EXCITAÇÃO

Em estruturas de QWs “Quantum Wells” baseados em semicondutores III-V, II-VI e suas ligas, flutuações na largura do poço (micro-rugosidades na interface) e na composição química das ligas que compõem o material do poço de potencial e/ou da barreira de confinamento são fontes de desordem que modulam o perfil local do potencial de confinamento da heteroestrutura. Estas desordens possuem um forte efeito sobre o movimento dos portadores e as recombinações radiativas para baixas temperaturas e baixas potências de excitação são geralmente dominadas por éxcitons localizados.^[6.1-6.12]

Os efeitos das flutuações do potencial de confinamento sobre o processo de recombinação excitônica em poços quânticos são comumente analisadas em termos das flutuações da largura do poço quântico.^[6.4-6.14] Flutuações da composição química da barreira (AlGaAs no caso do sistema AlGaAs/GaAs, por exemplo) são freqüentemente desconsideradas ou deixadas em segundo plano. O estudo é geralmente conduzido pela dependência da largura de linha das recombinações excitônicas em função da largura do poço^[6.21,6.22] ou pela posição da energia do pico de PL (E_{PL}) em função da temperatura.^[6.13-6.20]

A Figura 6.1 mostra o comportamento da E_{PL} com a temperatura no intervalo $8.5 \text{ K} \leq T \leq 50 \text{ K}$ para todas as amostras. Também é mostrado, para efeito de comparação, os resultados obtidos do GaAs “bulk” medidos a partir da camada “buffer” da amostra 2446. Observa-se um aumento consistente da magnitude do “blue-shift” para valores de x maiores que $x = 0.11$. Para $x = 0.11$ o efeito do Al na barreira é praticamente inexistente e o resultado é semelhante ao do GaAs “bulk”.

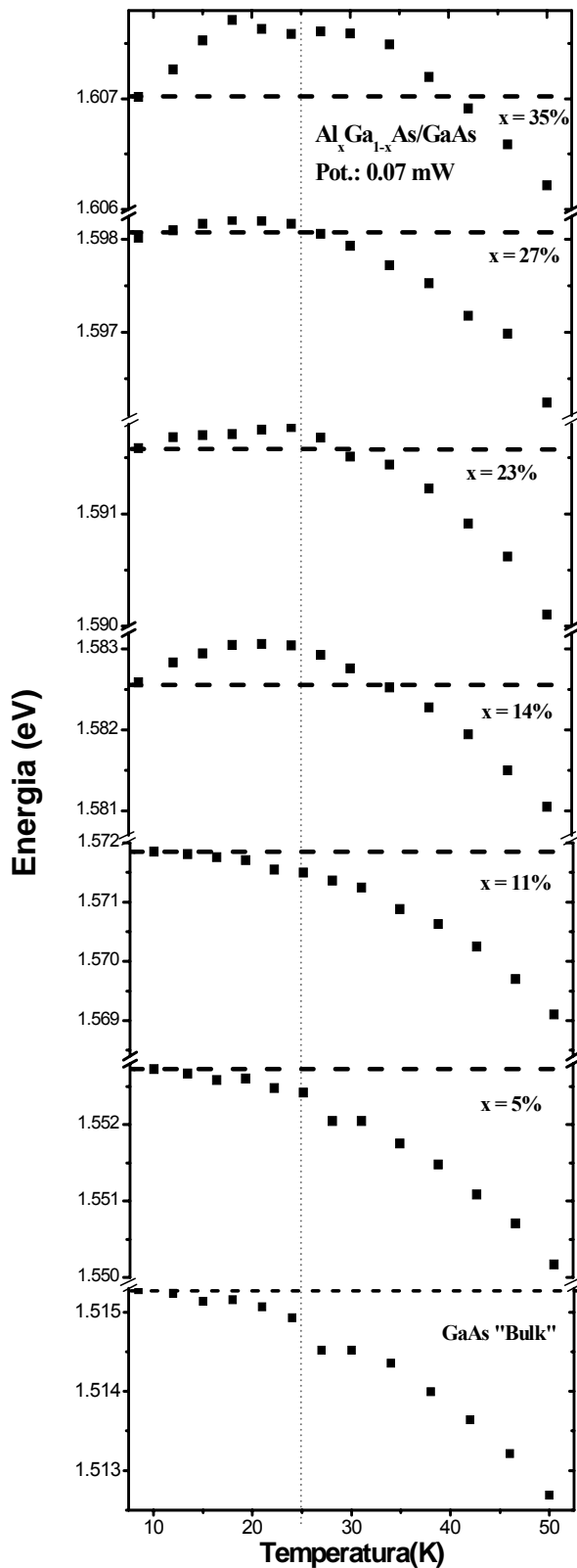


Figura 6.1 – Comportamento do pico de fotoluminescência em função de temperatura em poços quânticos de AlGaAs/GaAs para diferentes concentrações de Al na barreira sob mesma potência de excitação (0.07 mW).

Observa-se ainda que a temperatura do ponto máximo do “blue-shift”, T_M , desloca-se para valores menores à medida que diminui a concentração de Al. A magnitude do “blue-shift” e da temperatura de seu ponto máximo não variam de forma linear com a concentração de Al. Isto pode estar associado com pequenas variações nas condições de crescimento entre as amostras que refletem sobre as flutuações na interface e/ou flutuação da composição química da liga na barreira. Outro conjunto de medidas realizadas no mesmo laboratório [6.23] mostraram um comportamento mais homogêneo do “blue-shift” e da T_M . É possível que a pequena magnitude das flutuações, por exemplo, ~ 0.7 meV para $x = 0.35$, possa tornar as medidas nestas amostras muito sensíveis a pequenas variações do procedimento experimental, como a relação potência do laser/spot, por exemplo. Esta questão ainda requer um estudo experimental mais sistemático. Comportamento semelhante foi observado em ligas de Al_xGa_{1-x}N [6.20] e em QWs GaAs/GaAsSbN, [6.20] onde o material do poço é uma liga quaternária que apresenta alta magnitude das flutuações do potencial e o material da barreira é o binário GaAs.

Runge e Zimmermann ^[6.12] investigaram cuidadosamente sistemas que apresentam desde desordem fraca até desordem intermediária. Em sistemas onde as amplitudes das flutuações são baixas (sistemas com baixa desordem, como é o caso dos QWs de AlGaAs/GaAs) a termalização é completa. Com o aumento da temperatura (a partir de $T = 8.5$ K) os éxcitons são transferidos termicamente para estados de maior energia no rabo da banda até atingir a borda da banda de condução, deslocando E_{PL} em direção a maiores energias (“blue-shift”). Na Figura 6.2 apresentamos um modelo ilustrativo das flutuações do potencial e da forma de linha característica dos espectros de PL de tais sistemas. Com um incremento ainda maior na temperatura, a energia térmica vence a energia de localização excitônica e a forma de linha do espectro de PL torna-se uma forma de linha característica de éxcitons livres (FE), dando início ao “red-shift” característico da dependência do “gap” de energia dos materiais semicondutores com T . Embora este modelo microscópico proposto por Runge e Zimmermann seja o modelo mais completo atualmente, ele fornece somente soluções numéricas e nenhuma expressão analítica para comparação com os resultados experimentais foi obtida.

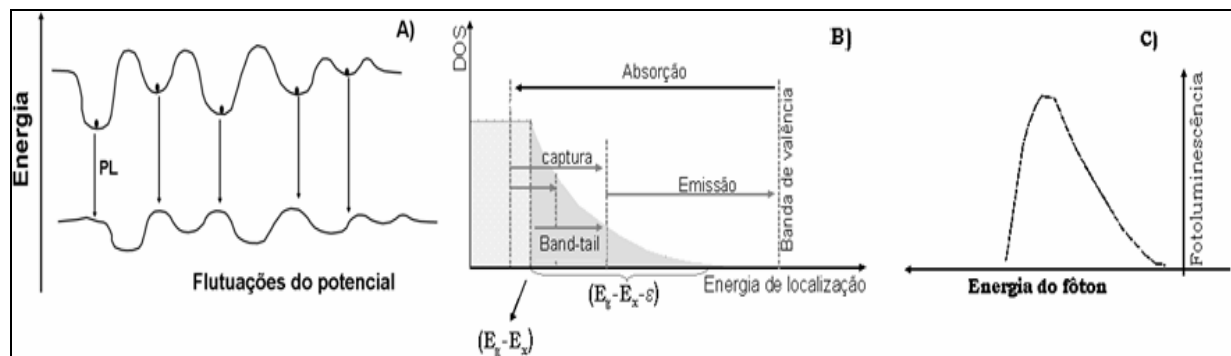


Figura 6.2 – A) Representação esquemática das flutuações do potencial. Os éxcitons estão localizados quando a energia térmica $k_B T$ é menor que as barreiras de potencial geradas pelas flutuações. Neste caso os éxcitons estão presos em um mínimo local. B) A densidade de estados bidimensional com um rabo exponencial que reflete as flutuações do potencial ao longo do plano (x,y) do poço e das flutuações da composição química da liga, onde E_g é a energia $(E_{n1}-E_{hh1})$ no poço, E_x é a energia de ligação do éxciton e ε é a energia de localização. C) Forma de linha característica dos espectros de PL. ^[6.23]

O aumento da concentração de alumínio na barreira aumenta as flutuações da composição química da liga, induzindo maiores amplitudes das flutuações do potencial. A penetração da função de onda excitônica na barreira com uma densidade de probabilidade relativamente grande na região fora do poço (ver Capítulo 2 Figura 2.11) faz com que os éxcitons sintam os efeitos das flutuações. Estes efeitos são evidenciados nos espectros

ópticos. Nossos resultados experimentais mostram, portanto, que os comportamentos previstos teoricamente por Runge e Zimmermann^[6.12] são sistematicamente reforçados nas amostras de AlGaAs/GaAs com maior concentração de alumínio na barreira.

6.2 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DA VARIAÇÃO DA ENERGIA DE RECOMBINAÇÃO EXCITÔNICA COM A TEMPERATURA A 7.0 mW (~16 W/cm²)

6.2.1 Comportamento dos parâmetros de ajuste das equações de Viña e Pässler *tipo-p* com a concentração de alumínio no intervalo de temperatura de 2 a 300 K

Inicialmente apresentamos alguns resultados obtidos neste trabalho em um intervalo de temperatura maior – até 300 K – para compararmos com os resultados publicados por S. A. Lourenço *et al.*^[6.25] já apresentados no Capítulo 3.

Nas Figuras 6.3 e 6.4 apresentamos as dependências com a concentração de Al dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler *tipo-p*, respectivamente. Os quadrados pretos representam os resultados deste trabalho com $\Delta T = 8.5 - 300$ K a 7.0 mW (~16 W/cm²). Os círculos vermelhos representam os resultados obtidos por S. A. Lourenço *et al.*^[6.25] com $\Delta T = 2 - 300$ K a 10.0 mW (~14.1 W/cm²). Os losangos azuis representam os resultados obtidos por Grilli *et al.*^[6.26] para o GaAs “bulk” com $\Delta T = 2-300$ K. Grilli *et al.* empregaram em seus experimentos uma baixa densidade de potência óptica para evitar qualquer aquecimento na amostra devido a excitação pelo laser: de 2 a 100 K a potência de excitação foi de 0.05 mW (~0.1 W/cm²) e para $T > 100$ K a potência foi aumentada para 1 mW com o “spot” do laser correspondentemente aumentado para que a densidade de potência incidente ficasse constante. Em nossas medidas de fotoluminescência no intervalo de 8.5 a 300 K não obtivemos resultados confiáveis para os poços com concentrações de $x = 0.05$, $x = 0.11$ e $x = 0.14$, pois seus espectros perderam a intensidade bem antes dos 300 K, possivelmente devido aos efeitos de fuga de elétrons. Além disso, com o aumento da temperatura os espectros do GaAs “bulk” e do poço de maior concentração alargam e se sobrepõem sobre o espectro do poço de menor concentração. Os dados experimentais de $E_g(T)$ para o GaAs “bulk” utilizados por S. A. Lourenço *et al.*^[6.25] para comparação com os

resultados de poços quânticos foram redigitalizados do trabalho de S. Logothetidis *et al.*^[6.27]

O parâmetro α_B foi obtido através da expressão $\alpha_B \cong 2a_B/\Theta_B$.

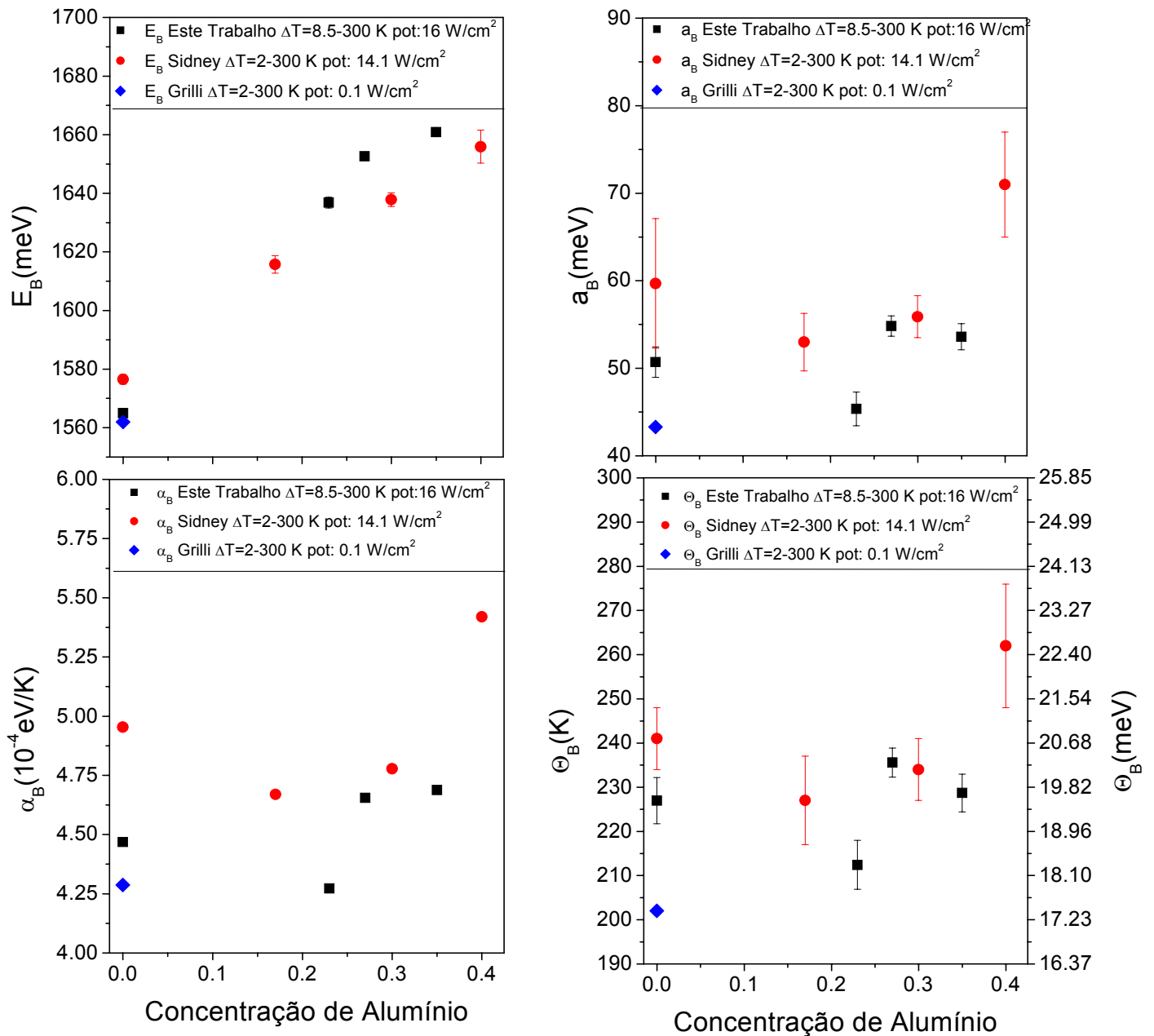


Figura 6.3 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Viña com a concentração de alumínio. Os quadrados pretos representam os resultados apresentados neste trabalho com $\Delta T = 8.5 - 300$ K e potência de excitação de 7.0 mW (~ 16 W/cm²), os círculos vermelhos representam os resultados do trabalho realizado por S. A. Lourenço *et al.*^[6.25] com $\Delta T = 2 - 300$ K e potência de excitação de 10 mW (~ 14.1 W/cm²) e o losango azul representa os resultados obtidos por Grilli *et al.* com $\Delta T = 2 - 300$ K.^[6.27]

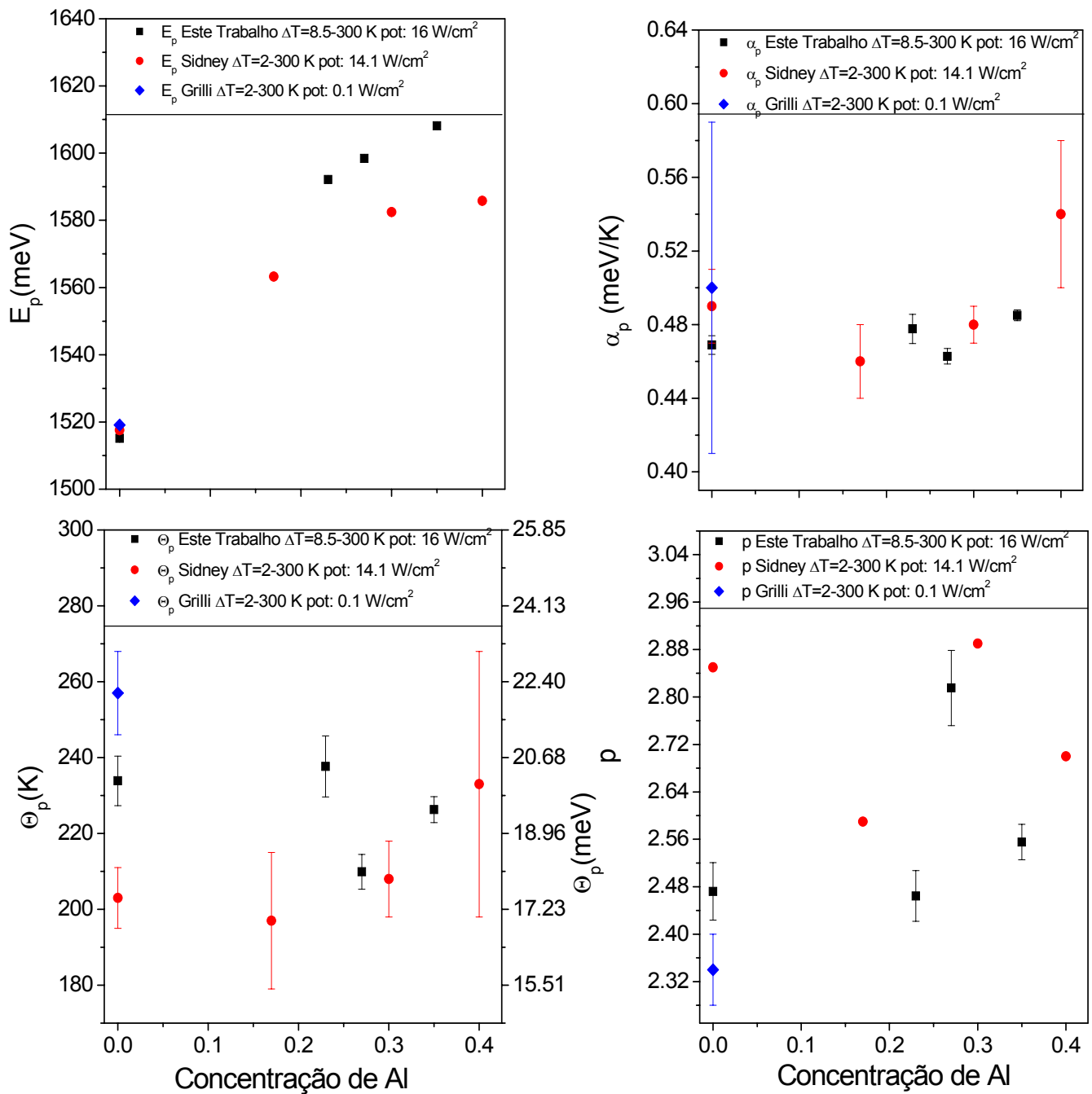


Figura 6.4 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Pässler *tipo-p* com a concentração de alumínio. Os quadrados pretos representam os resultados apresentados neste trabalho com $\Delta T = 8.5 - 300$ K e potência de excitação de 7.0 mW (~ 16 W/cm²), os círculos vermelhos representam os resultados do trabalho realizado por S. A. Lourenço *et al.*^[6,25] com $\Delta T = 2 - 300$ K e potência de excitação de 10 mW (~ 14.1 W/cm²) e o losango azul representa os resultados obtidos por Grilli *et al.* com $\Delta T = 2 - 300$ K.^[6,27]

As diferenças nos valores de energia de E_B e E_p quando comparados aos obtidos por S. A. Lourenço *et al.*^[6,25] podem estar associadas à largura dos poços discutidos

neste trabalho, que parecem ser mais estreitos ($\sim 50 \text{ \AA}$) quando analisados e confrontados com a largura nominal prevista ($\sim 60 \text{ \AA}$). O padrão de comportamento de E_B e E_p em função da concentração de Al é, entretanto, similar.

O comportamento dos parâmetros a_B , α_B e Θ_B do modelo de Viña com a concentração de Al é similar em ambos os trabalhos, apresentando um decréscimo quando passamos do “bulk” para o poço quântico e crescendo com o aumento de x . Este padrão já não é tão óbvio para o modelo de Pässler *tipo-p*, possivelmente devido a lacuna de dados na região de $0.05 < x < 0.23$ em nossos trabalhos. Os resultados de Grilli *et al.*^[6.26] ora confirmam o padrão (decréscimo do parâmetro quando passamos do sistema 3D para o quase-2D) como no caso de α_p e Θ_p , ora contrariam como no caso de a_B , α_B e Θ_B . De maneira geral os parâmetros mostram uma dependência com a concentração de Al e evidenciam o efeito do confinamento. O parâmetro p do modelo de Pässler *tipo-p*, entretanto, não mostra um comportamento sistemático com o aumento da concentração de Al em ambos os trabalhos.

É interessante ressaltar que estes resultados mostram, apesar da disparidade, que os valores dos parâmetros a_B do modelo de Viña e α e Θ dos diferentes modelos para o material “bulk” e poços quânticos com barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ na região de $0.2 < x < 0.3$ são geralmente muito próximos. Vários artigos argumentam em função disto que o comportamento da recombinação excitônica em função da temperatura em poços quânticos é o mesmo que o do material que compõe o poço.^[6.28-6.36]

No estudo realizado por S. A. Lourenço *et al.*^[6.25] foi utilizado um conjunto de poços quânticos com apenas três concentrações de Al na barreira (17%, 30% e 40%) e um dos poços tinha espessura diferente dos demais (55 \AA ao invés de 60 \AA). Esta pequena quantidade de dados experimentais e a diferença na largura de um dos poços podem mascarar o real comportamento dos parâmetros quando aumentamos a concentração de Al. Os dados experimentais para o GaAs “bulk” utilizados por eles para comparação com os resultados dos poços quânticos foram redigitalizados do trabalho realizado por Logothetidis *et al.*^[6.15] Devido aos dados experimentais para o GaAs “bulk” terem sido obtidos em outras condições experimentais é um fator a mais a prejudicar a comparação entre estes resultados e os resultados do poço quântico. É importante ressaltar que vários trabalhos disponíveis na literatura utilizam-se de comparações entre “bulk” e poços quânticos sem tomarem o devido cuidado com as condições experimentais em que foram realizadas as medidas, principalmente a potência de excitação.^[6.25,6.28-6.38]

6.2.2 Comportamento dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) com a potência de excitação para o GaAs “bulk”

Neste item foi realizada uma variação sistemática da potência de excitação de modo a encontrar a potência adequada para saturar ou blindar a flutuação de potencial nos poços quânticos sem causar renormalização do “gap” de energia ou efeitos de aquecimento local da rede tanto no GaAs “bulk” quanto nos poços quânticos.

As medidas de fotoluminescência para o GaAs “bulk” de 0.07 a 7.0 mW no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K permitem analisar a influência da potência de excitação nos parâmetros de ajuste de $E_g(T)$, dos diferentes modelos, diretamente, uma vez que o binário GaAs não apresenta flutuação de potencial. As curvas para $E_g(T)$ mostradas no Capítulo 5, Figura 5.10, são praticamente idênticas (no intervalo de 0.07 a 7.0 mW) não mostrando efeitos de renormalização do “gap” de energia ou de aquecimento local da rede. Os efeitos da potência de excitação sobre os parâmetros de ajuste podem ser visualizados nas Figuras 6.5, 6.6 e 6.7 onde apresentamos a variação dos parâmetros de ajuste para $E_g(T)$ no GaAs “bulk” com a potência de excitação, respectivamente, para os modelos de Viña (Figura 6.5), Pässler *tipo-p* (Figura 6.6) e Pässler *tipo-ρ* (Figura 6.7).

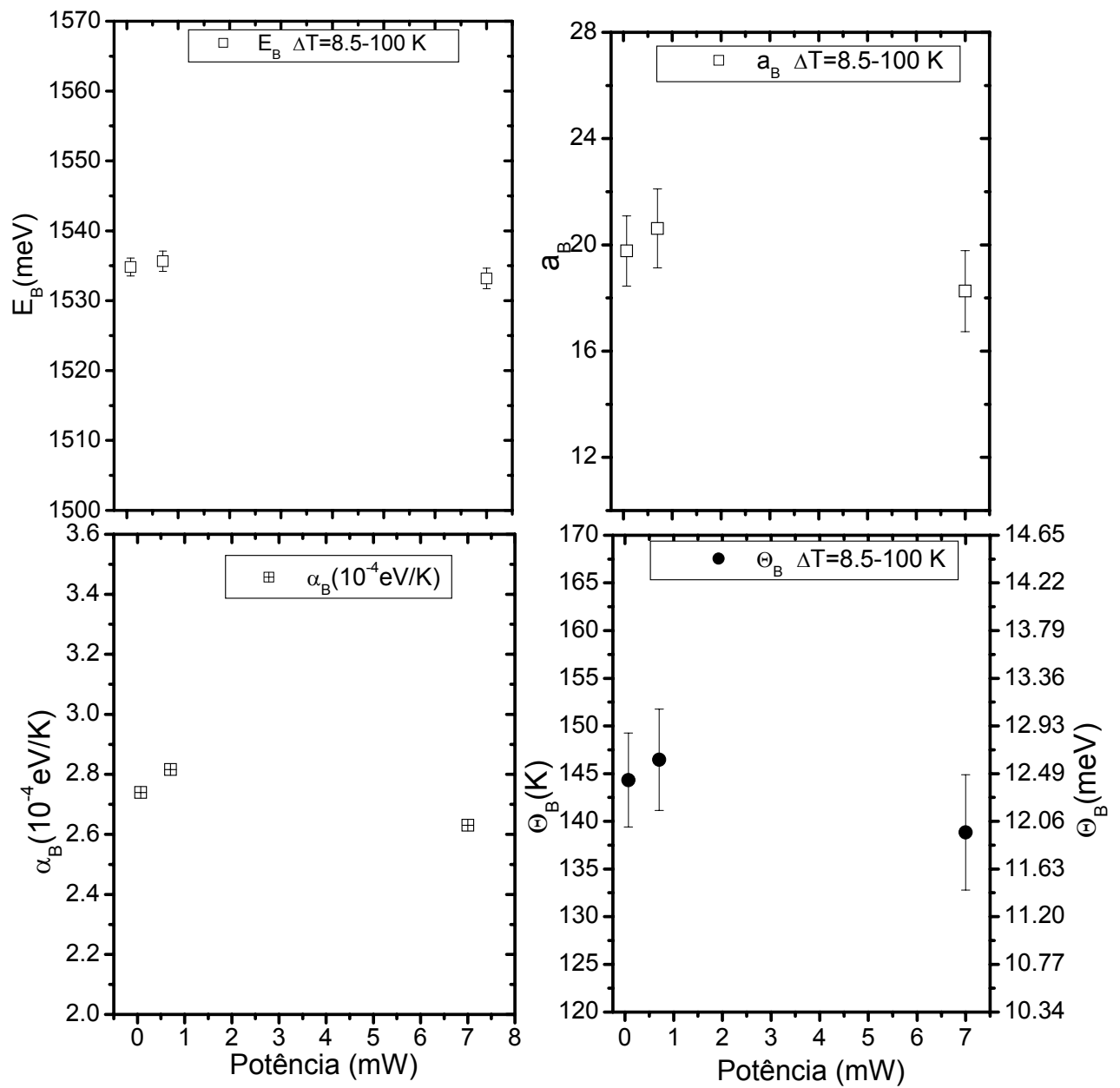


Figura 6.5 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Viña para o GaAs “bulk” com a potência de excitação no intervalo de 8.5 a 100 K.

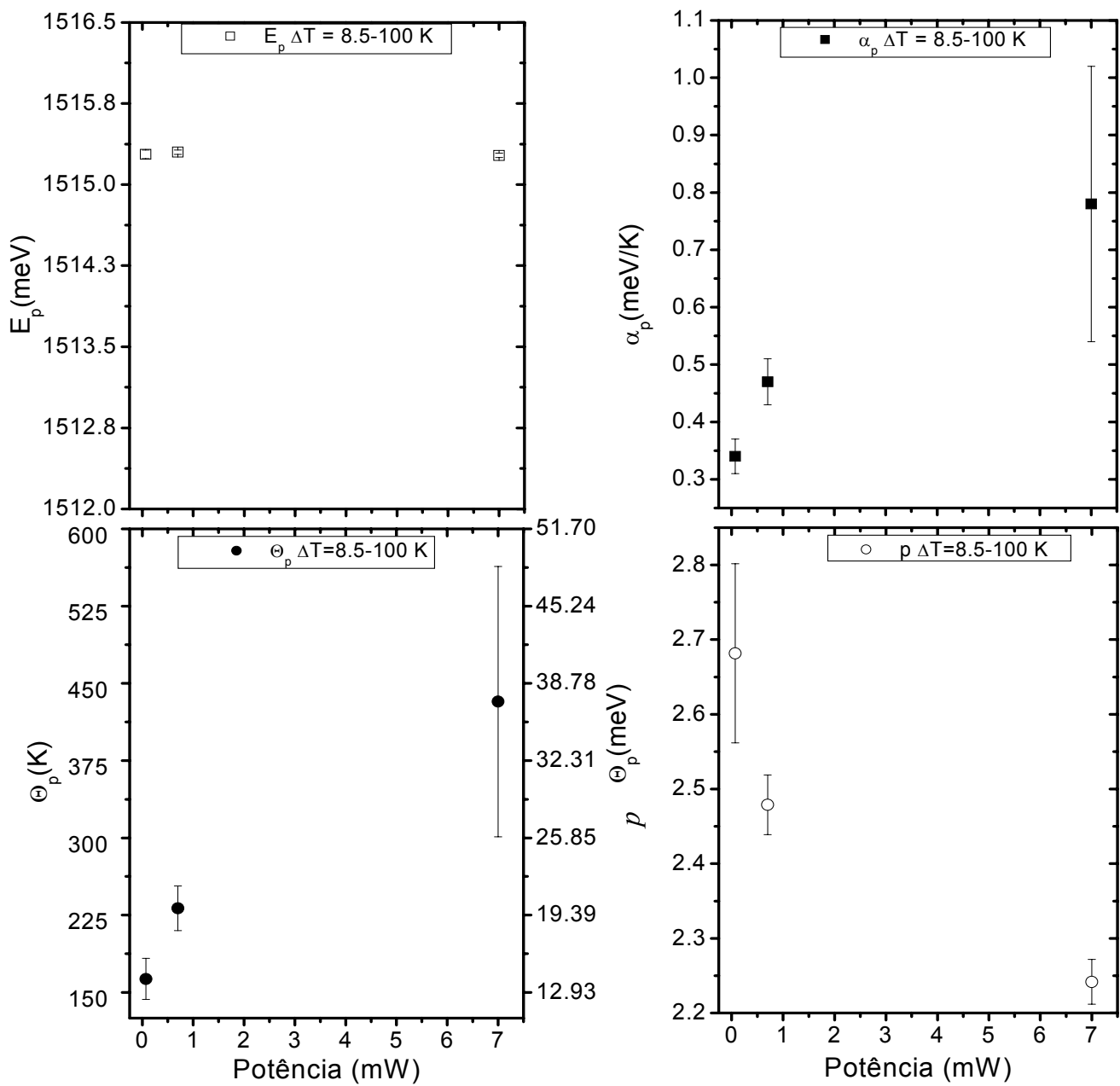


Figura 6.6 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Pässler *tipo-p* para o GaAs “bulk” com a potência de excitação no intervalo de 8.5 a 100 K.

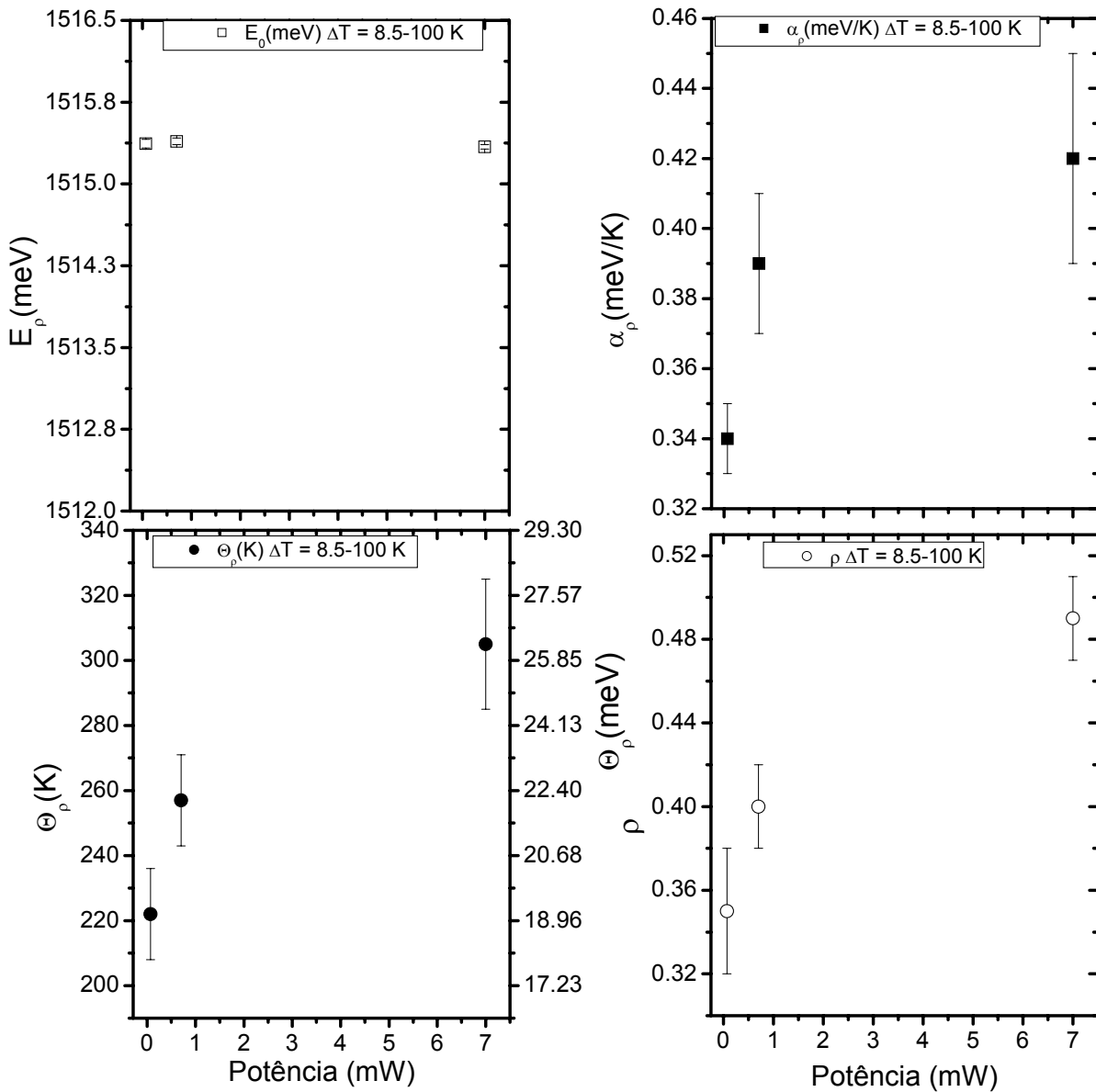


Figura 6.7 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Pässler *tipo- ρ* com a potência de excitação para o GaAs “bulk” no intervalo de 8.5 a 100 K.

A variação do “gap” de energia do GaAs com a temperatura no intervalo de temperatura analisado [$E_g(0\text{ K}) - E_g(100\text{ K})$] é aproximadamente a mesma (de ~ 12.6 a ~ 12.8 meV) para todas as potências de excitação mostrando não haver efeitos de aquecimento local da rede, pelo menos em primeira análise.

Os parâmetros de ajuste do modelo de Viña para a dependência das transições excitônicas no GaAs “bulk” com a temperatura praticamente não variam com a potência de excitação.

No modelo de Pässler *tipo-p* E_p é praticamente constante com valores dentro da barra de erro, mas os parâmetros α_p e Θ_p crescem e ρ decresce com o aumento da potência de excitação.

No modelo de Pässler *tipo- ρ* E_p permanece praticamente constante com a variação da potência de excitação. Os parâmetros α_p , Θ_p e ρ crescem com o aumento da potência de excitação. Não pretendemos aqui aprofundar esta análise que julgamos importante e para qual não encontramos informações na literatura. [Não existem ao que seja de nosso conhecimento análises do efeito da variação da potência de excitação sobre os parâmetros de ajuste de $E_g(T)$ na literatura]. Os resultados mostram de forma sistemática que a potência de excitação pode interferir de modo significativo na análise dos ajustes de $E_g(T)$ dos diferentes modelos.

Para um melhor entendimento da relação que os parâmetros de ajuste, comuns aos três modelos α_i e Θ_i ($i = B, p, \rho$), têm com a potência de excitação apresentamos na Figura 6.8 os parâmetros de ajustes renormalizados em relação à potência de excitação de 7.0 mW.

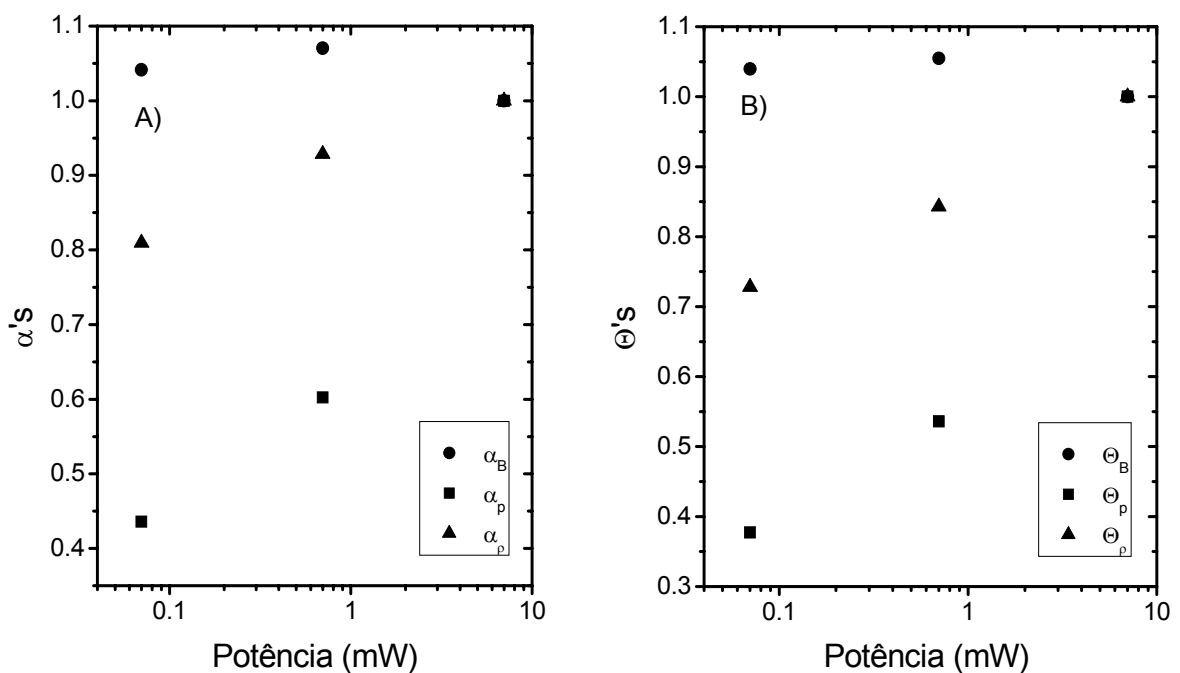


Figura 6.8 – Parâmetros α_i e Θ_i ($i = B, p, \rho$) dos modelos de Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo- ρ*), respectivamente, normalizado em relação a potência de excitação de 7.0 mW.

É possível ver com mais clareza, na Figura 6.8, o comportamento dos parâmetros de cada modelo em função da potência de excitação. No modelo de Viña os parâmetros praticamente não dependem da potência de excitação. O modelo de Pässler *tipo-p* é o que apresenta uma dependência mais forte, como se pode notar pela inclinação dos parâmetros α_p e Θ_p com a potência de excitação. Já no modelo de Pässler *tipo- ρ* os parâmetros dependem da potência de excitação, mas não tão fortemente quanto no modelo *tipo-p*. Como veremos mais à frente o modelo de Pässler *tipo- ρ* , onde o parâmetro ρ determina o peso da contribuição dos fônons ópticos/acústicos, apresenta resultados intermediário entre o modelo de Viña (que considera basicamente a interação elétron-fônon óptico) e o modelo de Pässler *tipo-p*.

Esta dependência com a potência de excitação dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (tipo-p e tipo- ρ) mostra que a comparação entre os resultados experimentais de “bulk” e poços quânticos deve ser feita com mais cautela, levando em conta as condições experimentais. Todos os trabalhos disponíveis na literatura sobre ligas ternárias, quaternárias e heteroestruturas, como poços quânticos, dos mais diversos materiais que mostram curvas de $E_g(T)$ sem os efeitos de flutuação composicional ou de interface – o “red/blue/red-shift” ou “blue/red-shift” do pico de fotoluminescência em função da temperatura – analisam sistemas sob condições de relativamente altas potências de excitação, ou seja, altas o suficiente para blindar ou saturar as flutuações do potencial eletrostático. Estes trabalhos podem, portanto estar comparando medidas no material “bulk”, binário que geralmente compõe o poço, a potências baixas, com medidas em heteroestruturas com potências mais altas necessárias para blindar as flutuações de potencial. [6.13, 6.16-6.25]

A potência relativamente alta, ~ 7.0 mW (~ 16 W/cm²), necessária à saturação das flutuações de potencial nos poços quânticos leva para um valor elevado os parâmetros – α_p , Θ_p , α_p , Θ_p – no “bulk”. O decréscimo abrupto dos valores destes parâmetros quando passamos de “bulk” (3D) para o poço quântico (quase-2D), como veremos a seguir, está associado a uma variação da interação elétron-fônon acústico em função das modificações da condições de espalhamento propiciada pelo levantamento da degenerescência da banda de buraco leve e buraco pesado devido ao confinamento quântico.

6.2.3 Comportamento dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) para o GaAs “bulk” e poços quânticos de AlGaAs/GaAs a 7.0 mW no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K

Inicialmente devemos destacar que de acordo com Pässler ^[6.39] os parâmetros dos diferentes modelos de ajuste da variação do “gap” de energia com a temperatura, $E_g(T)$, dependem primariamente da escolha da temperatura de “cut-off” (temperatura máxima do intervalo de análise), que é uma condição experimental arbitrária, em vez de serem parâmetros que caracterizam o material. Entretanto o intervalo de temperatura define os fônons que estarão predominando na interação elétron-fônon. Um rápido levantamento na literatura mostra uma variação dos parâmetros com o intervalo de temperatura. (Veja a Tabela 6.1). Os parâmetros variam significativamente com o aumento da temperatura máxima ($T_{\text{máx}}$), mas este também é um dado quantitativo a respeito de quais fônons estão sendo excitados. Observa-se também na Tabela 6.1 uma diferença entre os parâmetros do modelo de Viña obtidos por Grilli *et al.* ^[6.26] e por Pässler ^[6.40] para o mesmo conjunto de dados. Esta diferença possivelmente está mostrando-nos que o ajuste pelo modelo de Viña não está reproduzindo com confiabilidade os resultados experimentais.

Tabela 6.1 – Valores dos parâmetros de ajuste dos modelos de Viña e Pässler *tipo-p* disponíveis na literatura para o GaAs “bulk”.

a_B (meV)	α_B (10^{-4} eV/K)	α_p (10^{-4} eV/K)	Θ_B (meV)	Θ_p (meV)	p	Δp	ΔT	Ref.
10.40	2.03		8.82				2 a 77	6.26
43.30	4.29		17.4				2 a 280	6.26
50.03	4.51	4.7	19.1	19.4	2.51	0.43	2 a 280	6.40
57.00	4.75		20.7				20 a 500	6.41
		4.7		19.8	2.44	0.45	4 a 673	6.42

A determinação adequada da temperatura efetiva dos fônons Θ e da magnitude das derivadas de $E_g(T)$, como é o caso do parâmetro α ($\alpha \equiv S(T) = -(dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$), somente pode ser obtida se as medidas experimentais estenderem-se até a temperatura de Debye Θ_D . No caso da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a temperatura de Debye varia com a concentração de Al de acordo com a expressão: ^[6.43]

$$\Theta_D(x) = 370 + 54x + 22x^2. \quad (6.1)$$

Assim para $x = 0$, $\Theta_D(\text{GaAs}) = 370 \text{ K}$ ($\sim 31 \text{ meV}$) e para $x = 1$, $\Theta_D(\text{AlAs}) = 446 \text{ K}$ ($\sim 38 \text{ meV}$). Em nosso trabalho a temperatura máxima ($T^{\text{“cut-off”}}$) é 100 K ($\sim 8.6 \text{ meV}$), ou seja, $T^{\text{“cut-off”}}/\Theta_D(\text{GaAs}) \cong 0.27$ e $T^{\text{“cut-off”}}/\Theta_D(\text{AlAs}) \cong 0.22$. Entretanto encontramos análises na literatura para materiais com temperaturas de Debye relativamente altas, como por exemplo, $\Theta_D(\text{InN}) \cong 700 \text{ K}$, $\Theta_D(\text{GaN}) \cong 870 \text{ K}$ e $\Theta_D(\text{AlN}) \cong 1020 \text{ K}$, em intervalos de temperatura relativamente pequenos, entre aproximadamente 2 e 300 K, com $T_{\text{máx}}$, portanto aproximadamente 3 vezes menor que a temperatura de Debye.^[6.39]

Nosso estudo mostra que informações qualitativas e também quantitativas sobre os parâmetros de ajuste podem ser obtidas tomando os devidos cuidados, em intervalos de temperatura relativamente pequenos.

Apresentamos nas Figuras 6.9 a 6.11 a variação dos parâmetros de ajuste dos modelos de Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*), respectivamente, com a concentração de Al na barreira. Para efeito de comparação mostramos também os resultados obtidos para o GaAs “bulk” na mesma faixa de temperatura (8.5 a 100 K) a mesma potência de excitação (7.0 mW).

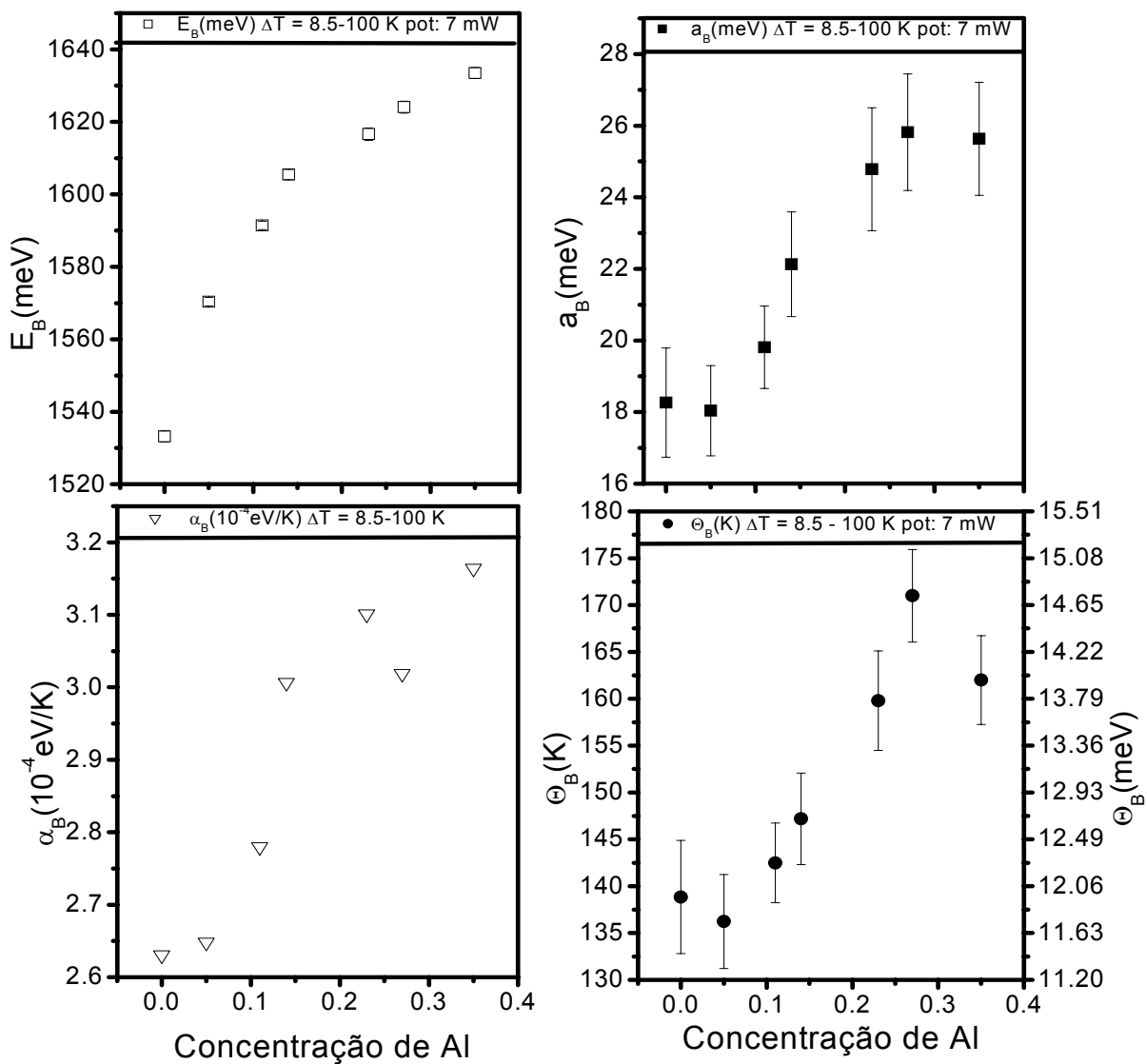


Figura 6.9 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Viña com a concentração de Al para o poço de AlGaAs/GaAs no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K e potência de excitação a 7.0 mW (~ 16 W/cm²). O parâmetro α_B é obtido fazendo $\alpha_B \equiv S(T) = - (dE/dT)_{T \rightarrow \infty} \cong 2a_B/\Theta_B$.

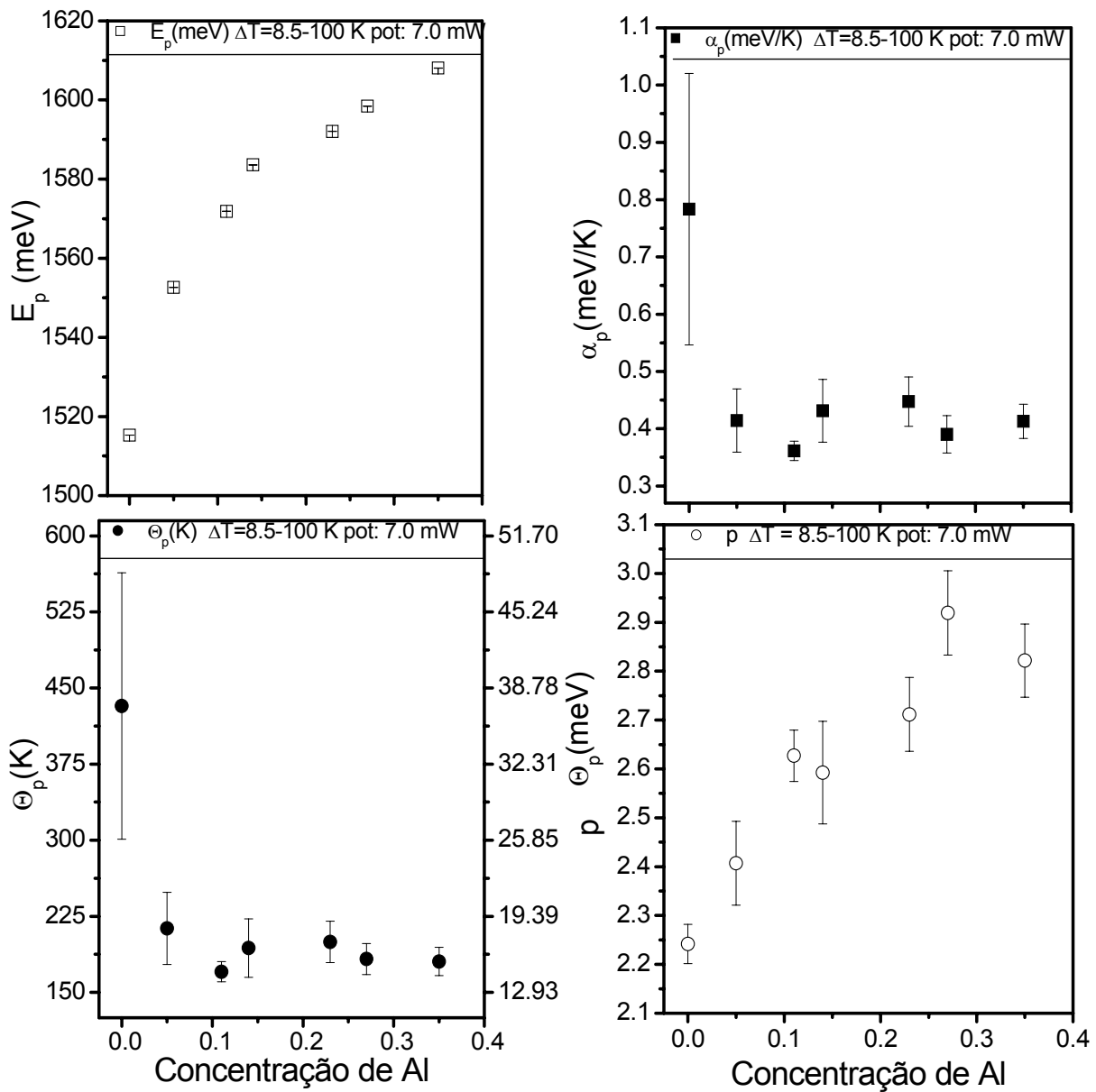


Figura 6.10 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Pässler *tipo-p* com a concentração de Al para o poço de AlGaAs/GaAs no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K e potência de excitação a 7.0 mW (~ 16 W/cm²).

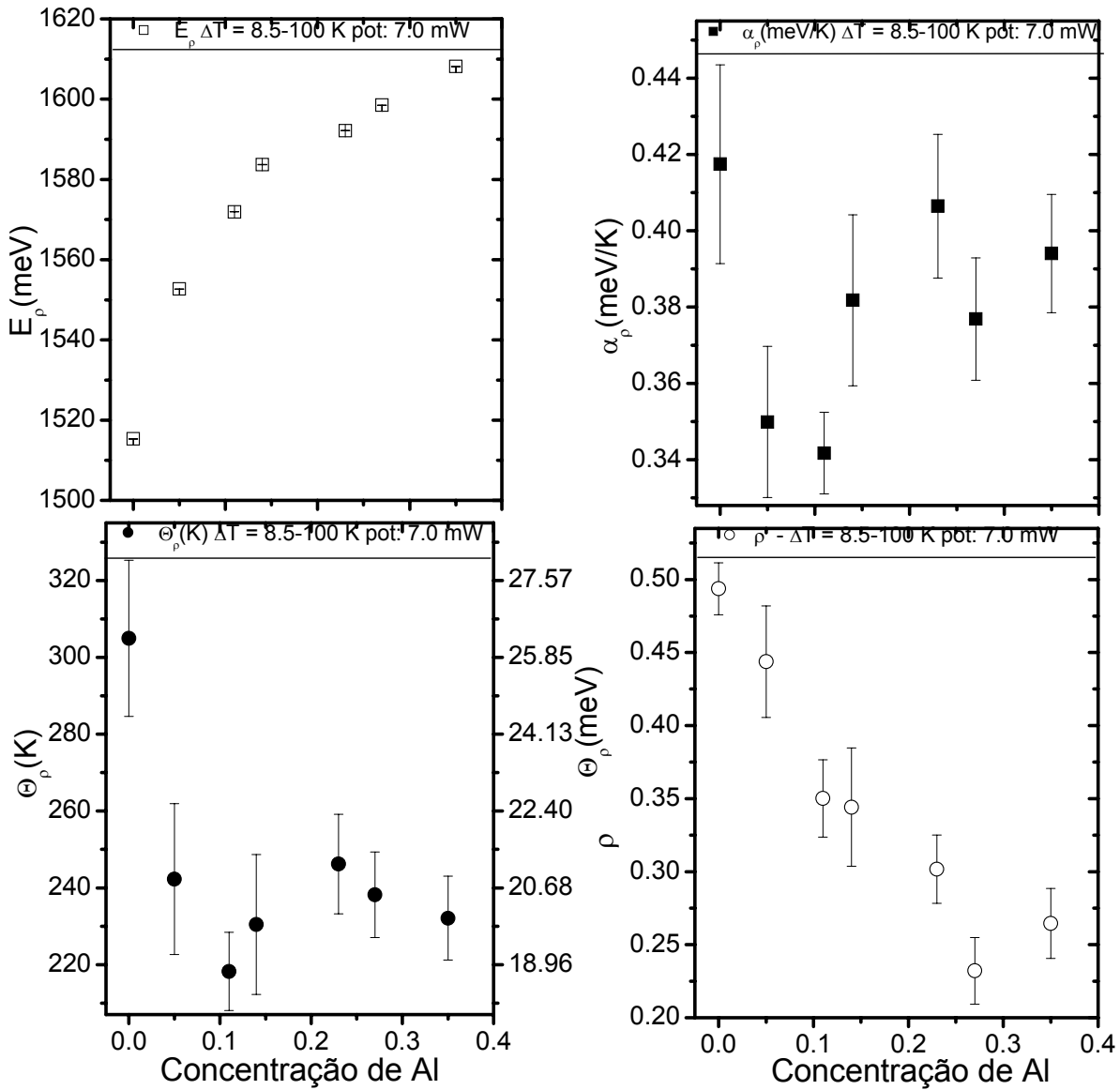


Figura 6.11 – Dependências dos parâmetros de ajuste da equação de Pässler *tipo- ρ* com a concentração de Al para o poço de AlGaAs/GaAs no intervalo de temperatura de 8.5 a 100 K e potência de excitação a 7.0 mW (~ 16 W/cm²).

O modelo de Pässler *tipo- p* é o que apresenta melhores resultados, de modo geral, com menor S^2 . O modelo de Pässler *tipo- ρ* apresenta S^2 maior que o modelo de Pässler *tipo- p* , mas inferior ao obtido com o modelo de Viña.

Os parâmetros associados ao “gap” de energia em $T = 0$ K, $E_B - a_B = E_g(T = 0$ K) no modelo de Viña, E_p no modelo Pässler *tipo- p* e E_ρ no modelo de Pässler *tipo- ρ* são relativamente insensíveis aos diferentes modelos de ajuste, mostrando padrão similar (a menos do erro). Todos aumentam com o aumento da altura de barreira ou da concentração de Al. Este

é um comportamento teoricamente bem conhecido em heteroestruturas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs. Cálculos teóricos baseados em aproximação usando a função envelope já previam este comportamento. ^[6.43]

Os parâmetros a_B (intensidade de interação elétron-fônon óptico) e Θ_B (energia efetiva média dos fônons) do modelo de Viña aumentam de forma sistemática com o aumento da concentração de Al a partir do valor obtido para o GaAs “bulk”. Parecem reduzir um pouco com o confinamento, $a_B(0.05) < a_B(0.00)$ e $\Theta_B(0.05) < \Theta_B(0.00)$, mas os valores permanecem constantes dentro da barra de erro. O parâmetro α_B também aumenta com a variação da concentração de Al.

Os parâmetros do modelo de Pässler *tipo-p* (α_p e Θ_p) para o poço quântico diminuem com o confinamento por um fator de 2 praticamente, e permanecem constantes com o aumento da concentração de Al. O parâmetro p aumenta com o aumento da concentração de Al de $p(x=0.0) = 2.2$ para $p(x=0.35) = 2.8$.

Os parâmetros α_ρ e Θ_r do modelo de Pässler *tipo- ρ* diminuem com o confinamento. O parâmetro Θ_p diminui em relação ao seu valor para o “bulk” por um fator de aproximadamente 1.3. O parâmetro α_ρ aumenta com o aumento da concentração de Al, porém Θ_p permanece praticamente constante em situação similar à verificada para Θ_p . A média de Θ_p no intervalo de concentração de Al analisado ($\langle\Theta_r\rangle_x$) entre 0.05 e 0.35, é superior, mas aproximadamente igual à mesma média obtida no modelo de Pässler *tipo-p* de Θ_p ($\langle\Theta_p\rangle_x$). $\langle\Theta_r\rangle_x = 17 \text{ meV} > 16.3 \text{ meV} = \langle\Theta_p\rangle_x$. O parâmetro ρ decresce com o aumento da concentração de Al.

Os parâmetros a_B , p e ρ são específicos de cada modelo e devem ser analisados separadamente.

Os parâmetros α_B , α_p e α_ρ , e Θ_B , Θ_p e Θ_r , podem ser analisados em conjunto. Para se ter uma idéia mais precisa do comportamento dos mesmos, apresentamos na Figura 6.12 os parâmetros α 's e Θ 's renormalizados em relação ao “bulk”. De modo geral os parâmetros α_B e Θ_B do modelo de Viña apresentam valores superiores ao “bulk”. Os parâmetros do modelo de Pässler *tipo-p* (α_p e Θ_p) são bastante inferiores ao “bulk” e os parâmetros do modelo de Pässler *tipo- ρ* (α_ρ e Θ_r) apresentam valores intermediários, entre o modelo de Pässler *tipo-p* e o modelo de Viña.

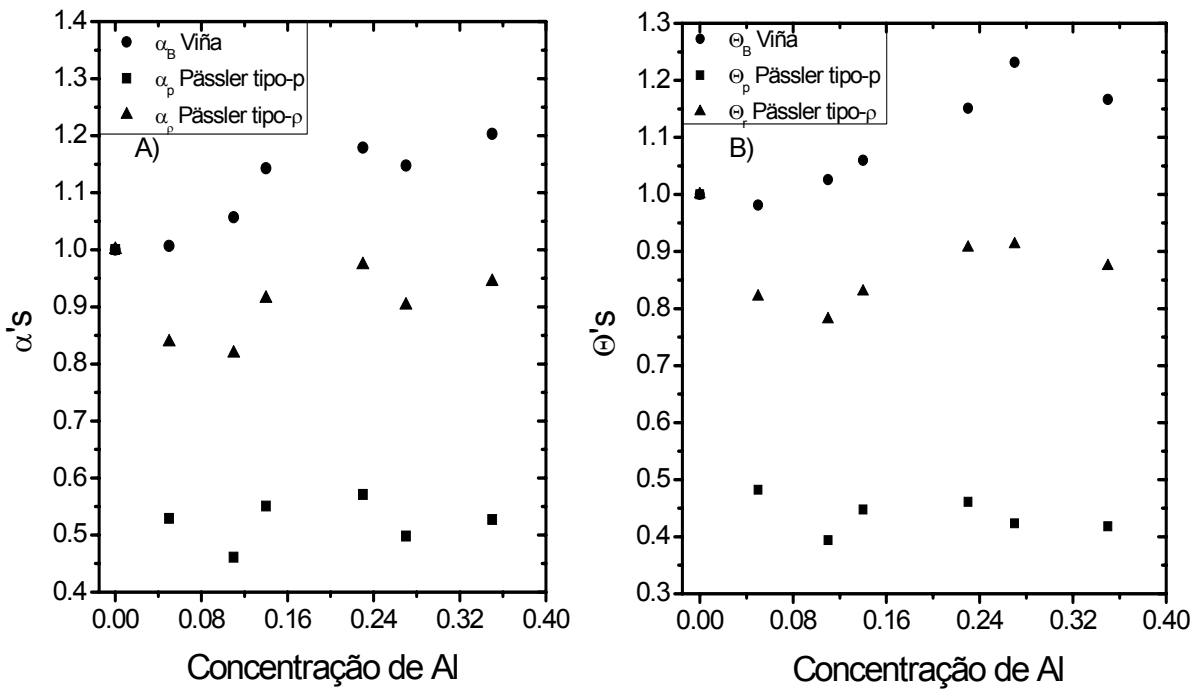


Figura 6.12 – Parâmetros α_i e Θ_i ($i = B, p, r$) renormalizados em relação ao valor do “bulk”.

O modelo de Pässler *tipo- ρ* é um modelo que considera a contribuição separada dos fônons ópticos e acústicos com ρ fornecendo o “peso” da contribuição de cada tipo de fônons. No limite de $\rho \rightarrow 0$ o modelo de Pässler *tipo- ρ* tende ao modelo de Viña (fônons ópticos dando a maior contribuição). No limite de $\rho \rightarrow 1$ o modelo de Pässler *tipo- ρ* tende a uma expressão que fornece somente a contribuição dos fônons acústicos. O fato de o ajuste com o modelo de Pässler *tipo- ρ* , com ρ variando de 0.49 a 0.25, apresentar resultados bons pode estar associado à definição do intervalo de temperatura analisado. Existe ainda uma relativa contradição sobre em que intervalos de temperatura predominam os diversos tipos de interação: elétron-fônons acústico ou elétron-fônons óptico. Medidas do comportamento da mobilidade em função da temperatura em heteroestruturas moduladas por dopagem apontam para um intervalo menor de predomínio da interação elétron-fônons acústico no espalhamento de portadores – $T \leq 40$ ou 50 K.^[6.44-6.46] Para $T > 50$ K, a interação elétron-fônons óptico começa a intervir e sua contribuição pode ser visualizada na relativa proximidade dos valores renormalizados dos parâmetros do modelo de Pässler *tipo- ρ* com os valores do modelo de Viña conforme mostra a Figura 6.12. Isto também explicaria o fato do modelo de Viña caracterizar-se como um platô, portanto não considerando os fônons acústicos, em

temperatura relativamente baixas: $T < 30$ K. Entretanto os ajustes com esta expressão proposta por Pässler neste limite de $\rho \rightarrow 1$ não são bons, tendo erros com valores muito superiores ao próprio valor dos parâmetros. O modelo de Pässler *tipo- ρ* contudo é melhor que o modelo de Viña no intervalo de temperatura e concentração de Al considerado, com menores valores de S^2 .

Assim, apesar de estarmos em uma região de adequada aplicabilidade do modelo de Pässler *tipo- ρ* (ver Tabela 6.2) com dispersão dada por $0.31 < \Delta\rho < 0.43$, [o modelo é considerado adequado para regiões de dispersão pequena e intermediária onde $0 \leq \Delta\rho \leq 0.577$],^[6.47] a expressão da parte relacionada aos fônons acústicos, quando analisada separadamente ($\rho = 1$), não apresenta bons resultados. Outros ajustes realizados em nosso laboratório^[6.48] com outras amostras de poços quânticos apresentaram o mesmo problema. Esta expressão funciona bem para materiais de “gap” de energia grande, como por exemplo, GaN.^[6.39]

Os resultados discutidos aqui parecem estar coerentes com os apresentados no Capítulo 2.

Tabela 6.2 – Valores dos parâmetros α_i , Θ_i ($i = B, p, r$), p e ρ (e suas respectivas dispersões) após o ajuste numérico dos dados experimentais (com as Equações 3.7; 3.11 e 3.13) da dependência com a temperatura ($\Delta T = 8.5$ a 100 K) da energia de combinação excitônica do GaAs “bulk” e poços quânticos de AlGaAs/GaAs com concentração de Al entre 0.05 e 0.35.

x	α_B (10^{-4} eV/K)	α_p (10^{-4} eV/K)	α_r (10^{-4} eV/K)	Θ_B (meV)	Θ_p (meV)	Θ_r (meV)	p	Δp	ρ	$\Delta\rho$
0.00	2.6	7.8	4.2	12.0	37.3	19.9	2.24	0.50	0.49	0.43
0.05	2.7	4.1	3.5	11.7	18.0	16.3	2.40	0.46	0.44	0.40
0.11	2.8	3.6	3.4	12.3	14.7	15.5	2.63	0.41	0.35	0.36
0.14	3.0	4.3	3.8	12.7	16.7	16.5	2.59	0.42	0.34	0.35
0.23	3.1	4.5	4.1	13.8	17.2	18.0	2.71	0.40	0.30	0.33
0.27	3.0	3.9	3.8	14.7	15.8	18.1	2.92	0.36	0.23	0.29
0.35	3.2	4.1	3.9	14.0	15.6	17.4	2.82	0.38	0.26	0.31

A interação elétron-fônon dada, pelo parâmetro α_B , e a energia média dos fônons, dada pelo parâmetro Θ_B na escala de temperatura, ambos do modelo de Viña, são

$$\text{associados a } \lambda = \frac{2\pi e^2 (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s) \sqrt{(m_e^* + m_h^*) \hbar \omega_{LO} / 2\hbar^2}}{q^2 \Omega} \quad \text{e a } \langle \hbar \omega_{LO} \rangle, \langle \hbar \omega_{TO} \rangle$$

respectivamente. Estes parâmetros foram discutidos no Capítulo 2, onde mostramos

evidências teóricas e experimentais que ambos crescem com o aumento da concentração de Al.

O confinamento faz decrescer a interação elétron-fônon acústico. Esta interação, entretanto não está expressa por nenhum fator específico nos modelos p e ρ discutidos, como é o caso de a_B no modelo de Viña para o fônon óptico. A interação deve estar associada de algum modo, entretanto, ao parâmetro α . Uma pista para isto é a expressão obtida para α através do modelo de Viña, onde $\alpha_B \equiv S(T) = - (dE/dT)_{T \rightarrow \infty} \cong 2a_B/\Theta_B$ com a_B sendo caracterizado como a interação elétron-fônon (predominantemente o óptico).

A energia efetiva dos fônons acústicos dada por ambos os modelos de Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) Θ_p e Θ_r permanece praticamente constante com um valor médio de $\langle \Theta_p \rangle_x = 16.3$ meV $\langle \Theta_r \rangle_x = 17$ meV. Estes valores estão um pouco acima da metade do ramo de fônons acústicos $\varepsilon_{LA} \cong 29/2 \cong 14.5$ meV. A energia dos fônons acústicos praticamente não se altera com o aumento da concentração de Al o que fica evidenciado pelo comportamento dos Θ 's de ambos os modelos.

A análise do valor de α ($\alpha \equiv S(T) = - (dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$) fica obviamente comprometida do ponto de vista quantitativo, entretanto é interessante fazer uma análise comparativa entre os modelos. O modelo de Pässler *tipo-p*, que parece estar “enxergando” primariamente fônons acústicos (que não dependem da concentração de Al), mantém o mesmo valor de α_p em toda faixa de concentração de Al para o poço quântico, ou seja, somente a interação elétron-fônon acústico é que determina a curvatura de $E_g(T)$. O modelo de Pässler *tipo-ρ* considera os fônons ópticos (cuja interação e energia média dependem da concentração de Al) e assim varia com x , mesmo no estreito limite com $T^{\text{“cut-off”}}$ baixa.

Para explicarmos o motivo do parâmetro p crescer com o aumento da concentração de Al temos que analisar a característica da função espectral utilizada para se obter o modelo de Pässler *tipo-p*.

$$f(\omega) = \begin{cases} v \left(\frac{\alpha}{k_B} \right) \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^v & \text{para } \omega < \omega_0 \\ 0 & \text{para } \omega > \omega_0 \end{cases} \quad (6.2)$$

onde ω_0 é a energia de “cut-off”. A energia de “cut-off”, determinada a partir dos ajustes de acordo com Pässler,^[6,47] é dada por $\hbar\omega_0 = \frac{(\nu+1)}{\nu} k_B \Theta_p = \frac{p}{(p-1)} k_B \Theta_p$ com $p = \nu + 1$. Seu valor para as concentrações de Al analisadas aqui está apresentado na Tabela 6.3.

Tabela 6.3 – Valor da energia de “cut-off” calculada a partir dos ajustes com o modelo de Pässler *tipo-p*.

x	$k_B \Theta_p$ (meV)	p	$\hbar\omega_0$ (meV)
0	37.3	2.24	67.34
0.05	18.0	2.40	30.86
0.11	14.7	2.63	23.74
0.14	16.7	2.59	27.19
0.23	17.2	2.71	27.25
0.27	15.8	2.92	24.03
0.35	15.6	2.82	24.16

Como pode ser visto na Tabela 6.3 o valor da energia de “cut-off” decresce a partir do “bulk” para o poço quântico com $x = 0.05$ e oscila em torno de 25.27 meV (dentro dos limites da barra de erro de Θ_p). O cálculo da energia (frequência) de “cut-off”, entretanto está associado em sistemas simples através da aproximação de Debye, à temperatura de Debye Θ_D . A temperatura de Debye, como vimos na Equação 6.1, depende da concentração de Al e aumenta com x . Outras energias características do sistema como a energia máxima dos ramos variam com a concentração de Al – a energia do fônon óptico longitudinal no vale Γ [LO(Γ)], por exemplo, é ~ 44.1 meV no GaAs “bulk” e ~ 51.0 meV no AlAs – (veja Tabela 2.2). A função espectral também se altera com o aumento de x , inclusive com o surgimento de um “gap” no espectro de fônons. Assim, é de se esperar que a energia de “cut-off” varie com a concentração de Al, o que não fica evidente do resultado do ajuste. Como vimos o modelo de Pässler *tipo-p* está identificando somente fônons acústicos nesta faixa de temperatura. Porém a função espectral relacionada aos fônons acústicos pode variar com a concentração de Al.

Para analisar isto temos duas hipóteses diferentes possíveis, representando extremos, para a variação de p :

- a) Os picos da densidade de estados não variam em energia, mas a magnitude varia.

b) As energias dos picos da densidade de estados aumentam, porém a magnitude não varia;

Esta situação está representada na Figura 6.13, onde apresentamos a Figura 4 da Ref. [6.49] como modelo para representarmos as duas hipóteses relacionadas acima.

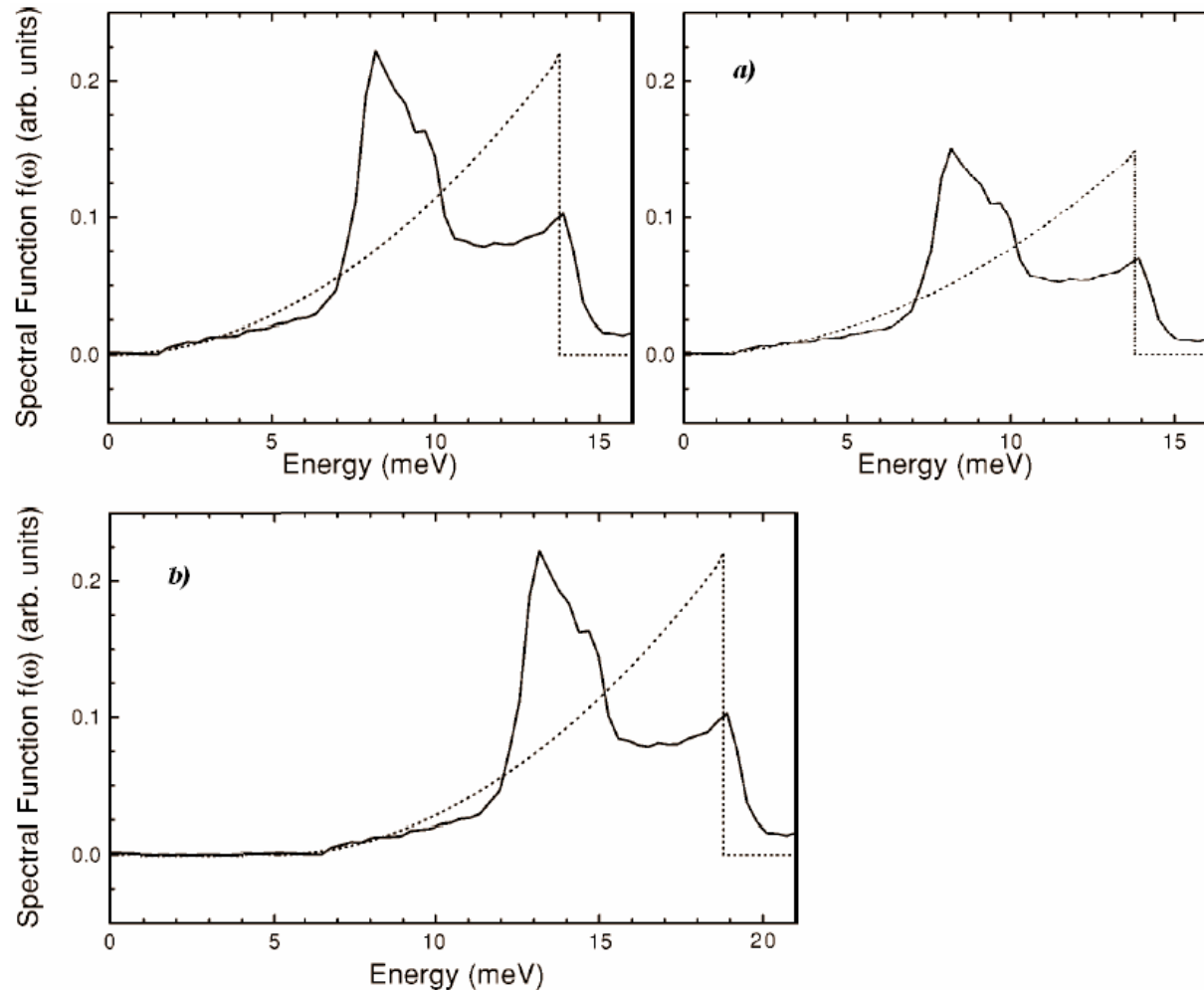


Figura 6.13 – Função espectral $f(\omega)$ adaptada da Ref. [6.49] para ser utilizada como modelo para representarmos as duas possíveis hipóteses que podem fazer o parâmetro p variar com a concentração de Al. *a)* Os picos da densidade de estados não variam em energia, mas a magnitude varia. *b)* As energias dos picos da densidade de estados aumentam com a concentração de Al, porém a magnitude não varia.

Nos dois casos, *a)* e *b)*, p aumenta com a concentração de Al.

Não podemos fazer uma afirmação categórica aqui a respeito do que ocorre exatamente para que p apresente o padrão visualizado na Figura 6.10, entretanto o que é conhecido é que a energia do fônon óptico aumenta com a concentração de Al e a função espectral dos fônons de interface (fônons LO) deve também variar com x em posição e

magnitude. Isto nos leva a crer que possa existir uma sobreposição de ambos os efeitos para que o parâmetro p cresça com o aumento da composição de Al.

Na análise do parâmetro ρ devemos levar em conta que quanto mais a concentração de Al aumenta, mais cresce a energia dos fônons ópticos. Com o aumento da concentração de Al surge um “gap” entre o máximo dos ramos acústicos e o mínimo dos ramos ópticos que aumenta com o aumento de x . Mantendo o mesmo intervalo de temperatura, o afastamento relativo dos ramos de fônons ópticos deve diminuir a probabilidade de excitação destes fônons. Todavia, este efeito deve ser menos intenso do que o aumento da energia média de vibração, que faz o parâmetro ρ decrescer com o aumento da concentração de Al aumentando o peso da contribuição associada à interação elétron-fônon óptico. O parâmetro α também está associado à interação elétron-fônon, por isso parâmetro α_ρ aumenta (a interação aumenta com x) e o ρ decresce.

Em resumo, os parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo- ρ*) para a variação do “gap” de energia com a temperatura no intervalo de 8.5 a 100 K dependem do material da barreira e não somente do material do poço. Estes parâmetros também dependem das condições experimentais, do intervalo de temperatura considerado para a análise e também da potência de excitação. Comparando os resultados do GaAs “bulk” (sistema 3D) com os do poço quântico (sistema quase-2D) conclui-se que: o modelo de Viña praticamente não enxerga o confinamento e despreza a interação elétron-fônon acústico; o modelo de Pässler *tipo-p* enxerga o confinamento quântico e a interação elétron-fônon acústico como sendo a mais intensa; e o modelo de Pässler *tipo- ρ* enxerga o confinamento quântico contemplando o peso relativo da interação elétron-fônon óptico (dado pelo parâmetro ρ) aumentando com o aumento da concentração de Al. O modelo de Pässler *tipo-p* é o modelo que apresenta o melhor ajuste, com menor S^2 .

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho tratou da dependência com a temperatura e potência de excitação das transições excitônicas no GaAs “bulk” e heteroestruturas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs com diferentes concentrações de Al ($0.05 < x < 0.35$) na barreira crescidos pela técnica de MBE. A técnica utilizada para obter a variação das transições excitônica com a temperatura no material “bulk” e nos poços quânticos foi a fotoluminescência. Analisamos os efeitos das flutuações do potencial de confinamento em poços quânticos de AlGaAs/GaAs sobre a variação das transições excitônicas com a temperatura e a dependência dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler *tipo-p* e *tipo-ρ* com a potência de excitação e com concentração de alumínio da liga $Al_xGa_{1-x}As$ que constitui as barreiras.

As principais conclusões obtidas deste trabalho são:

- A variação da energia do pico de PL (E_{PL}) com a temperatura apresenta um “blue-shift” na região de baixas temperaturas (9 – 30 K) e um “red-shift” para temperaturas superiores;
- O comportamento da variação da energia do pico de PL (E_{PL}) com a temperatura acompanha o comportamento tradicional da dependência do “gap” de energia com T dos materiais semicondutores III-V para temperaturas superiores a 35 K;
- O aumento da concentração de alumínio na barreira aumenta a flutuação da composição química da liga, aumentando o valor da FWHM e o valor do “blue-shift”;
- A composição do material da barreira, AlGaAs, atua de forma sistemática sobre os espectros de PL dos QWs de AlGaAs/GaAs reforçando os comportamentos previstos teoricamente por Zimmerman *et al.* em concordância com resultados teóricos apresentados recentemente por Ponomarev *et al.*;
- Os parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) obtidos da variação das recombinações excitônicas com a temperatura em poços quânticos dependem da composição da liga que constitui a barreira e não somente do material do poço;
- Os parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) dependem da potência de excitação.
- Os diferentes modelos de ajuste, mesmo apesar do avanço teórico proposto pelo trabalho de Pässler, ainda apresentam problemas para a descrição da variação do “gap”

de energia ou da recombinação excitônica com a temperatura. Esforços devem ser concentrados para a obtenção de um modelo que separe a interação elétron-fônon acústico da interação elétron-fônon óptico;

- Os parâmetros dos modelos propostos por Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*) evidenciaram o efeito de confinamento quando comparamos os resultados dos poços quânticos (sistema quase-2D) com os do GaAs “bulk” (sistema 3D) que constitui o poço em medidas à mesma potência de excitação.
- O modelo de Pässler *tipo-p* revelou-se o modelo que apresenta o melhor ajuste da variação do “gap” de energia ou da recombinação excitônica com a temperatura, ou seja, menor valor de S^2 .
- A dependência dos parâmetros de ajuste dos modelos propostos por Pässler com a potência de excitação mostrou que fazer comparações entre resultados obtidos em diferentes condições experimentais, principalmente a potências de excitação diferentes, pode não ser muito adequada;
- Os modelos de ajuste de $E_g(T)$ propostos por Viña e Pässler (*tipo-p* e *tipo-ρ*), se utilizados de forma sistemática, são ferramentas poderosas na análise de fenômenos físicos como, por exemplo, a interação elétron-fônon e o confinamento quântico.

Uma série de extensões pode ser desenvolvida na seqüência. Listamos algumas a seguir:

- Desenvolver um modelo que separe as intensidades de interações elétrons-fônon acústico da intensidade elétrons-fônon óptico;
- Discutir a correlação entre as intensidades de interações elétrons-fônons retiradas dos ajustes da variação do “gap” de energia ou das transições excitônicas com a temperatura $E_g(T)$ com as obtidas pelos ajustes da largura de linha a meia altura em função da temperatura – FWHM(T).
- Estudar a dependência com a largura do poço e com a temperatura dos parâmetros de ajuste dos diversos modelos em poços quânticos com largura variando de 50 a 700 Å;
- Efetuar medidas com outras técnicas, tais como, fotoluminescência de excitação (PLE), fotorefletância (PR) e magnetoluminescência, para uma melhor compreensão dos fenômenos físicos aqui estudados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**Referências do capítulo 1**

- [1.1] E. C. Valadares, L. A. Cury, M. Henini, *Ciência Hoje* **18** (106), 40 (1995).
- [1.2] F. Capasso, *Surf. Sci.* **513**, 142 (1984).
- [1.3] P. Zory, “Quantum Well Lasers”, Academic, New York, (1993).
- [1.4] T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fufii, K. Nambu, *Jpn. J. App. Phys.* **19**, L225 (1980).
- [1.5] Yoshihiro Sogiyama, Tsuguo Inata, Toshio Fujii, Yoshiaki Nakata, Shunichi Moto, and Satoshi Hiyamizu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **25**, L648 (1986).
- [1.6] H. C. Hamaker, C. W. Ford, J. G. Werthen, G. F. Virshup, N.R. Kaminar D. L. King and J. M. Gee, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 76 (1985).
- [1.7] R. Kudrawiec, M. Gladysiewicz, J. Misiewicz, H.B. Yuen, S.R. Bank, M.A. Wistey, H.P. Bae, James S. Harris, *Sol. Stat. Comm.* **137**, 138 (2006).
- [1.8] M.A. Herman, H. Sitter. “Molecular Beam Epitaxy”, Springer-Verlag, Berlin, p. 314 (1989).
- [1.9] D. S. Chemla, *Physics Today*, **38**, 35 (1985).
- [1.10] D. A. B. Miller, P. W. Smith, “Device and Circuit Applications of III-V Semiconductor Superlattice and Modulation Doping”, R. Dingle, ed., Academic. New York (1985).
- [1.11] D. A. Miller, D. S. Chemla, T. C. Domen, A. C. Gossard, W. Wiehmann, T. H. Wood, C. A. Burrus, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2173 (1984).
- [1.12] P. B. Allen and V. Heine, *J. Phys. C: Solid State* **9**, 2305 (1976).
- [1.13] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona, *Solid. State Commun.* **77**, 485 (1991).

- [1.14] P. B. Allen and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **23**, 1495 (1981).
- [1.15] A. Manoogian and J. C. Wolley, *Can. J. Phys.* **62**, 285 (1984).
- [1.16] J. P. Walter, R. R. L. Zucca, M. L. Cohen, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 102 (1970).
- [1.17] R. Pässler, *Phys. Status. Solidi. B* **200**, 155 (1997).
- [1.18] M. El Allali, C. B. Sorensen, E. Veje, and P. Tidemand-Petersson, *Phys. Rev. B* **48**, 4398 (1993).
- [1.19] S. Logothetidis, M. Cardona, and M. Garriga, *Phys. Rev. B* **43**, 11950 (1991).
- [1.20] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [1.21] M. Cardona, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 196403-1 (2004).
- [1.22] P. Debye, *Ann. Phys.* **22**, 180 (1907).
- [1.23] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **216**, 975 (1999).
- [1.24] Y. P. Varshni, *Physica (Utrecht)* **34**, 194 (1967).
- [1.25] A. Manoogian, and A. Leclerc, *Phys. Stat. Sol. B*, **92**, K23 (1979).
- [1.26] L. Viña, S. Logothetidis, and M. Cardona. *Phys. Rev. B* **30**, 1979 (1984).
- [1.27] V Alex, S. Finkbemer, and J Weber, *J. Appl. Phys.* **79**, 6943 (1996).
- [1.28] P. Lautenschlager, M. Garnga, S. Logothetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 9174 (1987).
- [1.29] P. Lautenschlager, M. Garnga, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **36**, 4813 (1987).

- [1.30] C. Lárez and C. Rincón. *J. Phys. Chem. Solids*, **58**, 1111 (1997).
- [1.31] Z. Hang, D. Yan, and Fred H. Pollak, *Phys. Rev. B* **44**, 10546 (1991).
- [1.32] F. G. Sanchez-Almazan, H. Navarro-Contreras, G. Ram' rez-Flores, and M. A. Vidal, *J. Appl. Phys.* **79**, 7713 (1996).
- [1.33] L. Malikova, Y. S. Huang, F. H. Pollak, Z. C. Feng, M. Schuman, and R. A. Stall, *Solid State Commun.* **103**, 273 (1997).
- [1.34] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, and Y. M. Kappor, *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [1.35] J. Filipowicz, C. Ghezzi, and L. Tamcone, *Sol. Stat. Com.* **74**, 533 (1990).
- [1.36] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. Wiegmann, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-20**, 265(1984).
- [1.37] D. Bimberg, J. Chnsten, A. Steckenborn, G. Weimann, and W. Schlapp, *Journal of Lumin.* **30**, 562 (1985).
- [1.38] Y. S. Huang, H. Qiang, Fred H. Pollak, G. D. Pettit, P. D. Kirchner, J. M. Woodall, Hans Stragier and L. B. Sorensen, *J. Appl. Phys.* **70**, 7537 (1991).
- [1.39] Y. G. Zhao, R. A. Masut, J. L. Brebner, C. A. Tran, and J. T. Graham, *J. Appl. Phys.* **76**, 5921 (1994).
- [1.40] S. A. Lourenço, I. F.L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, E. A. Meneses, J. R. Leite, and I. Mazzaro, *J. Appl. Phys.* **89**, 6159 (2001).
- [1.41] S. A. Lourenço, I. F.L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, D. O. Tuginho Filho, E. A. Meneses, and J. R. Leite. *Eur. Phys. J. B* **21**, 11 (2001).
- [1.42] E. M. Daly, T. J. Glynn, J. D. Lambkin, L. Considine, S. Walsh, *Phys. Rev. B* **52**, 4696 (1995).

- [1.43] A. Aït-Ouali, A. Chennouf, R. Y. F. Yip, J. L. Bredner, R. Leonelli, R. Masut, J. Appl. Phys. **84**, 5639 (1998).
- [1.44] S. Shirakata, M. Kondow, and T. Kitatani, Appl. Phys. Lett. **80**, 2087 (2002).
- [1.45] C. H. Chen, H. J. Chang, Y. F. Chen, W. S. Fann, H. X. Jiang, Y. Lin, Appl. Phys. Lett. **79**, 3806 (2001).
- [1.46] E. Laureto, E. A. Meneses, W. Carvalho JR, A. A. Bernussi, E. Ribeiro, E. C. F. da Silva, J. B. B. Oliveira, Braz. J. Phys. **32**, 314 (2002).
- [1.47] T. Makino, K. Tamura, C. H. Chia, Y. Segawa, M. Kawasaki, A. Ohtomo, H. Koinuma, J. Appl. Phys. **93**, 5929 (2003).
- [1.48] L. C. Poças, E. M. Lopes, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, S. A. Lourenço, E. Laureto, M. Valadares, P. S. S. Guimarães, L. A. Cury, J. C. Harmand, J. Appl. Phys. **97**, 103518 (2005).
- [1.49] J. Singh; e K. K. Bajaj, J. Appl. Phys. **57**, 5433 (1985); M. A. Herman, D. Bimberg, e J. Christen, J. Appl. Phys. **70**, R1 (1990); K. K. Bajaj, Mat. Sci. Eng. R **34**, 59 (2001).
- [1.50] Ouadjaout, D.; Marfaing, Y, Phys. Rev. B **46**, 7908 (1992).
- [1.51] Aït-Ouali, A.; Brebner, J. L.; Yip, R. Y. –F., e Masut, R. A., J. Appl. Phys. **86**, 6803 (1999); J. Appl. Phys. **83**, 3153 (1998).
- [1.52] Brunner, K.; Abstreiter, G.; Bohm, G.; Trankle, G.; e Weimann, G.; Appl. Phys. Lett. **64**, 3320 (1994).
- [1.53] Gammon, D.; Snow, E. S., e Katze, D. S., Appl. Phys. Lett. **67**, 2391 (1995).
- [1.54] Hess, H. F.; Betzig, E.; Harris, T. D., Pfeiffer L. N.; e West, K. W.; Science **264**, 1740 (1994).
- [1.55] Jahn, U.; Kwok, S. H.; Ramsteiner, M.; Hey, R.; Grahn, H. T.; e Runge, E.; Phys. Rev. B **54**, 2733 (1996).

- [1.56] Ramsteiner, M.; Hey, R.; Klann, R.; Jahn, U.; Gorbunova, I.; e Ploog, K. H.; Phys. Rev. B **55**, 5239 (1997).
- [1.57] Delalande, C.; Meynadier, M. H.; e Voos, M.; Phys. Rev. B **31**, 2497 (1985).
- [1.58] Gurioli, M.; Vinattieri, A.; Martinez-Pastor, J.; e Colocci, M.; Phys. Rev. B **50**, 11817 (1994).
- [1.59] Polimeni, A.; Patané, A.; Alessi, M. G.; Capizzi, M.; Martelli, F.; Basacchi, A.; e Franchi, S.; Phys. Rev. B **54**, 16389 (1996).
- [1.60] Runge, E.; e Zimmermann, R.; Adv. Solid. State, Phys. **38**, 251 (1998); Phys. Status Solidi A **164**, 511 (1997).
- [1.61] Grassi, M.; Fragano, A. F.; Patané, A.; –Capazi, M.; Runge, E.; e Zimmermann, R.; Phys. Rev. B **61**, 10985 (2000), e suas referências.
- [1.62] Buyanova, I. A.; Chen, W. M.; Pozina, G.; Bergman, J. P.; Monemar, B.; Xin, H. P.; e Tu, C. W.; Appl. Phys. Lett. **75**, 501 (1999).
- [1.63] Polimeni, A.; Capizzi, M.; Geddo, M.; Fischer, M.; Reinhardt, M.; e Forchel, A.; Appl. Phys. Lett. **77**, 2870 (2000).
- [1.64] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Poças, L. C.; Duarte, J. L.; Oliveira, J. B. B.; e Harmand, J. C.; J. Appl. Phys. **93**, 4475 (2003).
- [1.65] Kaschner, A.; Luttgert, T.; Born, H.; Hoffmann, A.; Egorov, A. Y.; e Riechert, H.; Appl. Phys. Lett. **78**, 1391 (2001).
- [1.66] Toginho Filho, D. O.; Dias, I. F. L.; Laureto E.; Duarte J. L.; Lourenco, S. A.; Poças, L. C.; Prabhu, S. S.; Klem, J.; J. Appl. Phys. **73**, 123702 (2005).
- [1.67] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; e Harmand, J. C.; “Temperature-dependent photoluminescence spectra of GaAsSb/AlGaAs and GaAsSbN/GaAs single quantum wells under different excitation intensities” (submetido para publicação; Mat. Sci. Eng. B).

- [1.68] Reynolds Appl. Phys. Lett. 46, 51 (1985); Bertol J. Appl. Phys. 64, 6562 (1988); Srinivas, Phys. Rev. B **46**, 10193 (1992).
- [1.69] Ponomarev, I. V.; Deych, L. I.; e Lisyansky, A. A.; Phys. Rev. B **71**, 155303 (2005).

Referências do capítulo 2

- [2.1] C. Weisbuch, “Applications of Multiquantum Wells, Selective Doping and Superlattices, in Semiconductors and Semimetals”. Edited by R. K. Willardson, A. C. Beer. Academic Press (1987).
- [2.2] D. S. Chemla, Physics Today, Vol. **38**, nº 35 (1985).
- [2.3] D. A. B. Miller, P. W. Smith, “Device and Circuit Applications of III-V Semiconductor Superlattice and Modulation Doping”, R. Dingle, ed. Academic. New York (1985).
- [2.4] D. A. B. Miller, Surf. Sci. **174**, 221 (1986).
- [2.5] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard. W. Wiegman, T. H. Wood. C. A. Burrus, Appl. Phys. Lett. **45**, 13 (1984); Optics Lett. **9**, 567 (1984).
- [2.6] E. C. Valadares, L. A. Cury, M. Henini. Ciência Hoje **18** (106), 40 (1995).
- [2.7] J. S. Blakemore. J. Appl. Phys. **53**, R123 (1982).
- [2.8] L. Pavesi, M. Guzi, J. Appl. Phys. **75**, 4779 (1994).
- [2.9] Landolt - Bornstein: “Numerical Datta and Functional Relationships in Science and Technology III/V – Semiconductors”- Ed. by O. Made lung, Springer - Ver lag, New York, 1982.
- [2.10] E. F. Schubert, “Quantum Mechanics Applied to Semiconductors Devices”, www.
- [2.11] S. Adachi, J. Appl. Phys. **53**, 5683 (1982).
- [2.12] D. S. Chuu and Y. C. Lou, Phys. Rev. B **43**, 14504 (1991).

- [2.13] L. C. Andreani and A. Pasquarello, *Phys. Rev. B* **42**, 8928 (1990).
- [2.14] J. Sing. “Physics of semiconductors and their heterostructures”. Edited by A. T. Brown, McGraw Hill. p. 167 (1993).
- [2.15] C. Weisbuch, B. Vinter, “Quantum Semiconductor Structures – Fundamentals and Applications”. Academic Press, Inc. (1991).
- [2.16] G. Bastard, “Wave Mechanics Applied to Semiconductor Physics”. Les Editions de Physique, Les Ulis Cedex (1988).
- [2.17] R. Eisberg, R. Resnick, “Física Quântica – Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas”. 4. ed. Editora Campus Ltda (1979).
- [2.18] S. Gaziorowicz, “Física Quântica”. Rio de Janeiro. Editora Guanabara Dois (1979).
- [2.19] A. Fracaro, H. Iwamoto, Comunicação Interna – Universidade Estadual de Londrina, 2005.
- [2.20] P. Lautenschlager, P. B. Allen, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **31**, 2163 (1985).
- [2.21] C. Lárez and C. Rincón, *J. Phys. Chem. Solids* **58**, 1111 (1997).
- [2.22] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. (b)* **200**, 155 (1997).
- [2.23] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 9174 (1987).
- [2.24] J. L. T. Waugh and G. Dolling, *Phys. Rev.* **132**, 2410 (1963).
- [2.25] Z. C. Feng, S. Perkowitz, D. K. Kinell, R. L. Whitney, and D. N. Talwar, *Phys. Rev. B* **47**, 13466 (1993).
- [2.26] E. Molinari, S. Baroni, P. Giannozzi, and S. de Gironcoli, *Phys. Rev. B* **45**, 4280 (1992).

- [2.27] K. Kim and W. G. Spitzer, *J. Appl. Phys.* **50**, 4362 (1979).
- [2.28] M. Ilegems and G. L. Pearson, *Phys. Rev. B* **1**, 1576 (1970).
- [2.29] C. Molteni, L. Colombo, L. Miglio, G. Benedek, and M. Bernasconi, *Philos. Mag. B* **65**, 325 (1992).
- [2.30] B. Monemar, *Phys. Rev. B* **8**, 5711 (1973).
- [2.31] J. Groener, R. Carie, G. Landa, C. Guerret-Piécourt, C. Fontaine, and M. Gendry, *Phys. Rev. B* **58**, 10452 (1998).
- [2.32] J. A. Kash, S. S. Jha, and J. C. Tsang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1869 (1987).
- [2.33] J. T. Devreese, *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* (North-Holland, Amsterdam, 1972).
- [2.34] W. Z. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 1285 (2001).
- [2.35] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. B* **26**, 1974 (1982).
- [2.36] K. W. Sun, H. Y. Chang, C. M. Wang, T. S. Song, S. Y. and Wang, C. P. Lee, *Solid State Commun.* **115**, 563 (2000).
- [2.37] H. C. Lee, K. W. Sun, and C. P. Lee, *J. Appl. Phys.* **92**, 268 (2002).
- [2.38] N. Mori and T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
- [2.39] K. Huang and B. Zhu, *Phys. Rev. B* **38**, 13377 (1988).
- [2.40] Lin Der-Yuh, Li Chi-Feng, Huang Ying-Sheng, *J. Appl. Phys.* **35**, 3576 (1996).
- [2.41] K. T. Tren, K. R. Wald, T. Ruf, P. Y. Yu, H. Morkoy, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2557 (1991).

- [2.42] K. Nash, Phys. Rev. B **46**, 7723 (1992).
- [2.43] S. Rudin, T. L. Reinecke, Phys. Rev B **41**, 7713 (1990).
- [2.44] T. Ruf, J. Spitzer, V. F. Belitskj, M. Cardona, and K. Ploog, Phys. Rev B **50**, 1792 (1994).
- [2.45] S. Baroni, S. Gironcoli, P. Giannozzi, Phys. Rev. Lett. **65**, 84 (1990).
- [2.46] S. Rudin, T. L. Reinecke, Phys. Rev. B **66**, 085314 (2002).
- [2.47] S. Srinivas, J. Hryniewicz, Y. J. Chen, C. E. C. Wood, Phys. Rev. B **46**, 10193 (1992).
- [2.48] L. Schulteis, A. Honold, J. Kuhl, K. Köhler, C. W. Tu, Phys. Rev. B **34**, 9027 (1986).
- [2.49] D. Gammon, S. Rudin, T. L. Reinecke, D. S. Katzer, C. S. Kyono, Phys. Rev. B **51**, 16785 (1995).
- [2.50] P. Borri, W. Langbein, J. M. Hvam, F. Martilli, Phys. Rev. B **59**, 2215 (1999).
- [2.51] S. Rudin, T. L. Reinecke, B. Segall, Phys. Rev. B **42**, 11218 (1990).
- [2.52] S. Rudin, T. L. Reinecke, Phys. Rev. B **65**, 121311 (2002).
- [2.53] R. Pässler, G. Oelgart, J. Appl. Phys. **82**, 2611 (1997).
- [2.54] J. Filipowicz, C. Ghezz, L. Tarricone, Solid State Commun. **74**, 533 (1990).
- [2.55] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. Wiegmann, IEEE J. Quantum Electron. **QE-20**, 265 (1984).
- [2.56] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, Y. M. Kapoor, F. A. Chambers, B. A. Vojak, J. M. Meese, Phys. Rev. B **37**, 1035 (1988).

- [2.57] D. Bimberg, J. Christen, A. Steckenborn, G. Weimann, W. Schlapp, *J. Lumin.* **30**, 562 (1985).
- [2.58] C. Ghezzi, D. Martin, A. Parisini, J.L. Staehli, L. Tarricone, *Phys. Stat. Sol. (b)* **152**, 101 (1989).
- [2.59] S. Selci, A. Cricenti, M. Righini, C. Petrillo, IV.4- F. Sacchetti, F. Alexandre, G. Chiarotti, *Appl. Surf. Sci.* **55**, 637 (1992).
- [2.60] Lin Der-Yuh, Li Chi-Feng, Huang Ying-Sheng, *J. Appl. Phys.* **35**, 3576 (1996).
- [2.61] Y.S. Huang, H. Qiang, H. Pollak Fred, G.D. Pettit, P.D. Kirchner, J.M. Woodall, S. Hans, B.S. Larry, *J. Appl. Phys.* **70**, 7537 (1991).
- [2.62] Y. Chen, R.L. Cingolani, C. Andreani, F. Bassani, *Nuovo Cimento* **10**, 847 (1988).
- [2.63] R. Kumar, S.S. Prabhu, A.S. Vergurlekar, *Physica Scripta* **56**, 308 (1997).
- [2.64] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Laureto, E.; Toghinho Filho, D. O.; Meneses, E. A.; e Leite, J. R., *Eur. Phys. J. B* **2**, 11 (2001).
- [2.65] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Laureto, E.; Iwamoto, H.; Meneses, E. A.; e Leite, J. R.; *Superlattice and Microstructures*, **29**, 225 (2001).
- [2.66] E. Mantovani, “Estudo das Propriedades Ópticas da Super-Rede InGaAs/InGaAlAs:Si Através da Técnica de Fotoluminescência”, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina (2004).
- [2.67] L. C. Poças, E. M. Lopes, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, S. A. Lourenço, E. Laureto, M. Valadares, P. S. S. Guimarães, L. A. Cury, J. C. Harmand, *J. Appl. Phys.* **97**, 103518 (2005).

Referências do capítulo 3

- [3.1] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, and Y. M. Kappor. *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [3.2] J. Filipowicz, C. Ghezzi, and L. Tarricone. *Solid State Communications* **74**, 533 (1990).

- [3.3] C. Ghezzi, D. Martin. A. Parisini, J. L. Staehli, and L. Tarricone. *Phvs. Stat. Sol. B* **152**, 101 (1989).
- [3.4] S. Selei, A. Cricenti. M. Righini. C. Petrillo. F. Sacchetti. F. Alexandre, and G. Chiarotti, *Applied Surface Science* **55**, 637 (1992).
- [3.5] H. Fesefeldt, *Z. Phys.* **64**, 623 (1930).
- [3.6] T. Muto and S. Oyama, *Prog. Theor. Phys.* **5**, 333 (1950).
- [3.7] H. Y. Fan, *Phys. Rev.* **82**, 900 (1951).
- [3.8] M. Cardona, *Physical Review Letters* **92**, 196403-1 (2004).
- [3.9] P. Debye, *Ann. Phys.* **22**, 180 (1907).
- [3.10] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **216**, 975 (1999).
- [3.11] P. B. Allen and V. Heine, *J. Phys. C: Solid State* **9**, 2305 (1976).
- [3.12] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona, *Solid. State Commun.* **77**, 485 (1991).
- [3.13] P. B. Allen and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **23**, 1495 (1981).
- [3.14] A. Manoogian and J. C. Wolley, *Can. J. Phys.* **62**, 285 (1984).
- [3.15] Z. Hang, D. Yan, F.H. Pollak, G. D. Pettit, J. M. Woodall. *Phys. Rev. B*, **44**, 10546 (1991).
- [3.16] R. Pässler, *Phys. Status. Solid. B* **200**, 155 (1997).
- [3.17] J. P. Walter, R. R. L. Zucca, M. L. Cohen, Y. R. Shen, *Phys. Rev. Letters* **24**, 102 (1970).

- [3.18] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Laureto, E.; Poças, L. C.; Toginho Filho, D. O.; e Leite, J. R., *Bras. J. Phys.* **34**, 517 (2004).
- [3.19] M. El Allali, C. B. Sorensen, E. Veje, and P. Tidemand-Petersson, *Phys. Rev. B* **48**, 4398 (1993).
- [3.20] S. Logothetidis, M. Cardona, and M. Garriga, *Phys. Rev. B* **43**, 11950 (1991).
- [3.21] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [3.22] E. Antoncik, *Czech. J. Phys.*, **5**, 449 (1955).
- [3.23] C. S. Guenzar, A. Bienestock, *Phys. Rev. B* **48**, 4655 (1973).
- [3.24] S. Gopalan, P. Lautenschlager, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 5577 (1987).
- [3.25] Y. P. Varshni, *Physica (Utrecht)*. **34**, 194 (1967).
- [3.26] R. Pässler, G. Oelgart. *J. Appl. Phys.* **82**, 2611 (1997).
- [3.27] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, E. A. Meneses, J. R. Leite, I. Mazzaro, *J. Appl. Phys.* **89**, 6159 (2001).
- [3.28] D. Toginho Filho, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, S. A. Lourenço, and L. C. Poças, S. S. Prabhu, J. Klem, *J. Appl. Phys.* **97**, 123702 (2005).
- [3.29] E. Mantovani, “Estudo das Propriedades Ópticas da Super-Rede InGaAs/InGaAlAs:Si Através da Técnica de Fotoluminescência”, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina (2004).
- [3.30] L. C. Poças, E. M. Lopes, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, S. A. Lourenço, E. Laureto, M. Valadares, P. S. S. Guimarães, L. A. Cury, J. C. Harmand, *J. Appl. Phys.* **97**, 103518 (2005).
- [3.31] R. Pässler, *Phys. Rev. B* **66**, 085201 (2002).

- [3.32] L. Viña, S. Logthetidis, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **30**, 1979 (1984).
- [3.33] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **35**, 9174 (1987).
- [3.34] P. Lautenschlager, M. Garriga, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **36**, 4813 (1987).
- [3.35] E. Grilli, M. Guzzi, R. Zamboni, L. Pavesi. *Phys. Rev. B*, **45**, 1638 (1992).
- [3.36] R. Pässler, *Phys. Status. Solidi. B* **193**, 135 (1996).
- [3.37] R. Pässler, *Solid State Electronics*. **39**, 1311 (1996).
- [3.38] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **88**, 2570 (2000).
- [3.39] J. Filipowicz, C. Ghezz, L. Tarricone, *Solid State Commun.* **74**, 533 (1990).
- [3.40] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. Wiegmann, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-20**, 265 (1984).
- [3.41] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, Y. M. Kapoor, F. A. Chambers, B. A. Vojak, J. M. Meese, *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [3.42] D. Bimberg, J. Christen, A. Steckenborn, G. Weimann, W. Schlapp, *J. Lumin.* **30**, 562 (1985).
- [3.43] C. Ghezzi, D. Martin, A. Parisini, J.L. Staehli, L. Tarricone, *Phys. Stat. Sol. (b)* **152**, 101 (1989).
- [3.44] S. Selci, A. Cricenti, M. Righini, C. Petrillo, IV.4- F. Sacchetti, F. Alexandre, G. Chiarotti, *Appl. Surf. Sci.* **55**, 637 (1992).
- [3.45] Lin Der-Yuh, Li Chi-Feng, Huang Ying-Sheng, *J. Appl. Phys.* **35**, 3576 (1996).
- [3.46] Y.S. Huang, H. Qiang, H. Pollak Fred, G.D. Pettit, P.D. Kirchner, J.M. Woodall, S. Hans, B.S. Larry, *J. Appl. Phys.* **70**, 7537 (1991).

- [3.47] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, D. O. Toghinho Filho, E. A. Meneses, J. R. Leite, *Eur. Phys. J. B* **21**, 11 (2001).
- [3.48] T. H. Chiu, W. T. Tsang, S. N. G. Chu, J. Shah, and J. A. Ditzenberger, *Appl. Phys. Lett.* **46**, 408 (1985).
- [3.49] B. Shin, A. Lin, K. Lappo, R. S. Goldman, M. C. Hanna, S. Francoeur, A. G. Norman, A. Mascarenhas, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3292 (2002).
- [3.50] M. Ichimura, K. Higuchi, Y. Hattori, T. Wada, and N. Nitamura, *J. Appl. Phys.* **68**, 6153 (1990).
- [3.51] D. Bimberg, B. Srocka, Datareview: "Photoluminescence of pure InGaAs alloys - Properties of lattice-matched and strained Indium Gallium Arsenide", edited by Pallab Bhattacharya-University of Michigan, USA, (1993).
- [3.52] E. Laureto, "Influência das Interfaces sobre as Propriedades Óticas de Poços Quânticos de GaInP/GaAs", Tese de Doutorado, Campinas, SP, 2002.
- [3.53] J. Singh e K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **57**, 5433 (1985); M. A. Herman, D. Bimberg, e J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, R1 (1990); K. K. Bajaj, *Mat. Sci. Eng. R* **34**, 59 (2001).
- [3.54] D. Ouadjaout, Y. Marfaing, *Phys. Rev. B* **46**, 7908 (1992).
- [3.55] A. Aït-Ouali, J. L. Brebner, R. Y. -F. Yip, e R. A. Masut, *J. Appl. Phys.* **86**, 6803 (1999); *J. Appl. Phys.* **83**, 3153 (1998).
- [3.56] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Bohm, G. Trankle, e G.; Weimann, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3320 (1994).
- [3.57] D. Gammon, E. S. Snow, e D. S. Katze, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2391 (1995).
- [3.58] H. F. Hess, E. Betzig, T. D. Harris, L. N. Pfeiffer e K. W. West, *Science* **264**, 1740 (1994).
- [3.59] U. Jahn, S. H. Kwok, M. Ramsteiner, R. Hey, H. T. Grahn, e E.; Runge, *Phys. Rev. B* **54**, 2733 (1996).

- [3.60] M. Ramsteiner, R. Hey, R. Klann, U. Jahn, I. Gorbunova, e K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **55**, 5239 (1997).
- [3.61] C. Delalande, M. H. Meynadier, e M. Voos, *Phys. Rev. B* **31**, 2497 (1985).
- [3.62] M. Gurioli, A. Vinattieri, J. Martinez-Pastor, e M. Colocci, *Phys. Rev. B* **50**, 11817 (1994).
- [3.63] A. Polimeni, A. Patané, M. G. Alessi, M. Capizzi, F. Martelli, A. Basacchi, e S. Franchi, *Phys. Rev. B* **54**, 16389 (1996).
- [3.64] E. Runge, e R. Zimmermann, *Adv. Solid. State, Phys.* **38**, 251 (1998); *Phys. Status Solidi A* **164**, 511 (1997).
- [3.65] M. S. Skolnick, P. R. Tapster, S. J. Bass, N. Apsley, A. D. Pitt, N. G. Chew, A. G. Cullis, S. P. Aldred, C. A. Warwick, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 1455 (1986).
- [3.66] M. Grassi, A. F. Fragano, A. Patané, M. Capazi, E. Runge, e R.; Zimmermann, *Phys. Rev. B* **61**, 10985 (2000), e suas referências.
- [3.67] E. Laureto, E. A. Meneses, W. Carvalho Jr, A. A. Bernussi, E. Ribeiro, E. C. F. Silva, e J. B. B. Oliveira, *Brazilian J. Phys.* **32**, 314 (2002).
- [3.68] Reynolds *Appl. Phys. Lett.* **46**, 51 (1985); Bertloli *J. Appl. Phys.* **64**, 6562 (1988); Srinivas, *Phys. Rev. B* **46**, 10193 (1992).
- [3.69] I. V. Ponomarev, L. I. Deych, e A. A. Lisiansky, *Phys. Rev. B* **71**, 155303 (2005).
- [3.70] I. A. Buyanova, W. M. Chen, G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, H. P. Xin, e C. W. Tu, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 501 (1999).
- [3.71] A. Polimeni, M. Capizzi, M. Geddo, M. Fischer, M. Reinhardt, e A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2870 (2000).
- [3.72] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, L. C. Poças, J. L. Duarte, J. B. B. Oliveira, J. C. Harmand, *J. Appl. Phys.* **93**, 4475 (2003).

- [3.73] A. Kaschner, T. Luttgert, H. Born, A. Hoffmann, A. Y. Egorov, e H. Riechert, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1391 (2001).
- [3.74] D. O. Toghinho Filho, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, S. A. Lourenco, L. C. Poças, S. S. Prabhu, J. Klem, *J. Appl. Phys.* **73**, 123702 (2005).
- [3.75] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, e J. C. Harmand, “Temperature-dependent photoluminescence spectra of GaAsSb/AlGaAs and GaAsSbN/GaAs single quantum wells under different excitation intensities” (submetido para publicação; *Mat. Sci. Eng. B*).
- [3.76] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Laureto, E.; Iwamoto, H.; Meneses, E. A.; e Leite, J. R.; *Superlattice and Microstructures* **29**, 225 (2001).

Referências do capítulo 4

- [4.1] Arthur, J.R. *J. Appl. Phys.*, **39**, 4032 (1968).
- [4.2] Cho, A.Y., *J. Appl. Phys.* **41**, 2780 (1970).
- [4.3] R. Kudrawiec, M. Gladysiewicz, J. Misiewicz, H.B. Yuen, S.R. Bank, M.A. Wistey, H.P. Bae, James S. Harris, *Sol. Stat. Comm.* **137**, 138 (2006).
- [4.4] M. A. Herman, and H. Sitter in “Molecular Beam Epitaxy”, Springer-Verlag, Berlin, p. 29 and 36 (1989).
- [4.5] J. H. Neove, B. A. Joecy, P. J. Dabson, and N. Norton, *Appl. Phys.* **A34**, 179 (1984).
- [4.6] R. Dingle, C. Weisbrech, H. L. Stomer, H. Morkoc, and A. Y.Cho, *Appl. Phys. Lett.* **40**,507 (1978).
- [4.7] J. H. Neave, and B. A. Joyce, *J. Cryst. Growth*, **44** 357 (1978). 166
- [4.8] A. P. Lima, “Crescimento e caracterização de semicondutores crescidos por MBE”, dissertação de mestrado, Instituto de Física da USP, São Paulo (1994).

- [4.9] A. L. Sperandio, “Crescimento Hepitaxial por Feixe Molecular de Camadas para Aplicação em Dispositivos”, dissertação de mestrado, Instituto de Física da USP, São Paulo (1997).
- [4.10] L. Pavesi, M. Guzi, *J. Appl. Phys.* **75**, 4779 (1994).
- [4.11] P. S. Chemla, *Physics Today* **38**, 35 (1985).
- [4.12] Roberto Cingoloni, Klaus Ploog. *Advances in Physics.* **40**, 558 (1991), R. Kumar, S. S. Prabhu and A. S. Vengurlekar, *Phys. Scripta*, **56**, 308 (1997), A. Gopal, R. Kumar, and A. S. Vengurlekar, et. al., *J. Appl. Phys.*, **87**, 1858 (2000).
- [4.13] P. O. Holtz, B. Monemar, M. Sundaram, J. L. Merz, A. C. Gossard. *Physica Scripta* **T39**, 188 (1991).
- [4.14] R.C. Miller, A. C. Gossard, W.T. Tsang, O. Munteanu, *Phys. Rev. B*, **25**, 3871 (1982).
- [4.15] V. C. Montanher. “Propriedades Ópticas de Heteroestruturas Semicondutoras de GaAs/AlGaAs”, dissertação de mestrado, Universidade de São Paulo, São Paulo (1996).

Referências do capítulo 5

- [5.1] S. Rudin, T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B* **66**, 085314 (2002).
- [5.2] R. C. Iotti, L. C. Andreani, *Phys. Rev. B* **56**, 3922 (1997).
- [5.3] A. Venu Gopal, R. Kumar, A. S. Vengurlekar, A. Bosacchi, S. Franchi, and L. N. Pfeiffer, *J. Appl. Phys.* **87**, 1858 (2000).
- [5.4] R. Kumar, S. S. Prabhu and A. S. Vengurlekar, *Phys. Scripta*, **56**, 308 (1997).
- [5.5] E. Grilli, M. Guzzi, R. Zamboni, L. Pavesi. *Phys. Rev. B*, **45**, 1638 (1992).
- [5.6] E. Mantovani, “Estudo das Propriedades Ópticas da Super-Rede InGaAs/InGaAlAs:Si Através da Técnica de Fotoluminescência”, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina (2004).

- [5.7] P. B. Allen and V. Heine, *J. Phys. C: Solid State* **9**, 2305 (1976).
- [5.8] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona, *Solid. State Commun.* **77**, 485 (1991).
- [5.9] P. B. Allen and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **23**, 1495 (1981).
- [5.10] A. Manoogian and J. C. Wolley, *Can. J. Phys.* **62**, 285 (1984).
- [5.11] J. P. Walter, R. R. L. Zucca, M. L. Cohen, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 102 (1970).
- [5.12] D. Lüerßen, R. Bleher, and H. Kalt, *Phys. Rev. B* **61**, 15812 (2000).
- [5.13] Lourenço, S. A.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Laureto, E.; Poças, L. C.; Toginho Filho, D. O.; Leite, J. R., *Bras. J. Phys.* **34**, 517 (2004).
- [5.14] D. Olguin, M. Cardona, A. Cantarero, *Solid State Comm.* **122**, 575 (2002).
- [5.15] J. Lee, E. S. Koteles, M. O. Vassell, *Phys. Rev. B* **33**, 5512 (1986).
- [5.16] D. Gammon, S. Rudin, T. L. Reinnecke, D. S. Katzer, and C. S. Kyono, *Phys. Rev. B* **51**, 16785 (1995).
- [5.17] C. Weisbuch and R. G. Ulbrich, "Light Scattering in Solids III", edited by M. Cardona and G. Guntherot (Springer-Verlag, Berlin, 1982), pp 207-263.
- [5.18] S. Rudin, T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B* **65**, 121311 (2002).
- [5.19] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, D. J. Eilenberger, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. T. Tsang, *Appl. Phys. Lett.* **41**(8), 679 (1982).
- [5.20] L. Schultheis, A. Honold, J. Kuhl, K. Köhler, C. W. Tu, *Phys. Rev. B* **34**, 9027 (1986).
- [5.21] S. Srinivas, J. Hryniewicz, Y. J. Chen, C. E. C. Wood, *Phys. Rev. B* **46**, 10193 (1992).

- [5.22] T. Ruf, J. Spitzer, V. F. Sapega, V. I. Belitsky, M. Cardona e K. Ploog, *Phys. Rev. B* **50**, 1792 (1994).
- [5.23] R. Pässler and Oelgart, *J. Appl. Phys.* **82**, 2611 (1997).
- [5.24] J. Singh and K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **57**, 5433 (1985); M. A. Herman, D. Bimberg, and J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, R1 (1990); K. K. Bajaj, *Material. Scien. Engin. R* **34**, 59-120 (2001).
- [5.25] Djamel Ouadjaout, Yves Marfaing, *Phys. Rev. B* **46**, 7908 (1992).
- [5.26] A. Ait-Ouali, J. L. Brebner, R. Y. F. Yip, and R. A. Masut, *J. Appl. Phys.* **86**, 6803 (1999); *J. Appl. Phys.* **83**, 3153 (1998).
- [5.27] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Bohm, G. Trankle, and G. Weimann, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3320 (1994).
- [5.28] D. Gammon, E. S. Snow, and D. S. Katze, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2391 (1995).
- [5.29] H. F. Hess, E. Betzig, T. D. Harris, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Science* **264**, 1740 (1994).
- [5.30] U. Jahn, S. H. Kwok, M. Ramsteiner, R. Hey, H. T. Grahn, and E. Runge, *Phys. Rev. B* **54**, 2733 (1996).
- [5.31] M. Ramsteiner, R. Hey, R. Klann, U. Jahn, I. Gorbunova, and K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **55**, 5239 (1997).
- [5.32] C. Delalande, M. H. Meynadier, and M. Vôos, *Phys. Rev. B* **31**, 2497 (1985).
- [5.33] M. Gurioli, A. Vinattieri, J. Martinez-Pastor, and M. Colocci, *Phys. Rev. B* **50**, 11817 (1994).
- [5.34] A. Polimeni, A. Patané, M. G. Alessi, M. Capizzi, F. Martelli, A. Basacchi, and S. Franchi, *Phys. Rev. B* **54**, 16389 (1996).

- [5.35] E. Runge, and R. Zimmermann, *Adv. Solid. State, Phys.* **38**, 251 (1998); *Phys. Status Solidi A* **164**, 511 (1997).
- [5.36] S. A. Lourenço, I. F.L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, E. A. Meneses, J. R. Leite, and I. Mazzaro, *J. Appl. Phys.* **89**, 6159 (2001).
- [5.37] H. Mathieu, P. Lefebvre, P. Christol, *J. Appl. Phys.* **72**, 300 (1992). H. Mathieu, P. Lefebvre, P. Christol, *Phys. Rev. B* **46**, 4092 (1992).
- [5.38] D. F. César, J. L. Duarte, *Comunicação Interna, GOO*, 2005.

Referências do capítulo 6

- [6.1] J. Singh, e K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **57**, 5433 (1985); M. A. Herman, D. Bimberg, e J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, R1 (1990); K. K. Bajaj, *Mat. Sci. Eng. R* **34**, 59 (2001).
- [6.2] D. Ouadjaout, Y. Marfaing, *Phys. Rev. B* **46**, 7908 (1992).
- [6.3] A. Aït-Ouali, J. L. Brebner, R. Y. –F. Yip, e R. A. Masut, *J. Appl. Phys.* **86**, 6803 (1999); *J. Appl. Phys.* **83**, 3153 (1998).
- [6.4] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Bohm, G. Trankle, e G. Weimann, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3320 (1994).
- [6.5] D. Gammon, E. S. Snow, e D. S. Katze, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2391 (1995).
- [6.6] H. F. Hess, E. Betzig, T. D. Harris, L. N. Pfeiffer, e K. W. West, *Science* **264**, 1740 (1994).
- [6.7] U. Jahn, S. H. M. Kwok, Hey, R. Ramsteiner, H. T. Grahn, e E. Runge, *Phys. Rev. B* **54**, 2733 (1996).
- [6.8] M. Ramsteiner, R. Hey, R. Klann, U. Jahn, I. Gorbunova, e K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **55**, 5239 (1997).
- [6.9] C. Delalande, M. H. Meynadier, e M. Voos, *Phys. Rev. B* **31**, 2497 (1985).

- [6.10] M. Gurioli, A. Vinattieri, J. Martinez-Pastor, e M. Colocci, *Phys. Rev. B* **50**, 11817 (1994).
- [6.11] A. Polimeni, A. Patané, M. G. Alessi, M. Capizzi, F. Martelli, A. Basacchi, e S. Franchi, *Phys. Rev. B* **54**, 16389 (1996).
- [6.12] E. Runge, e R. Zimmermann, *Adv. Solid. State, Phys.* **38**, 251 (1998); *Phys. Status Solidi A* **164**, 511 (1997).
- [6.13] M. Grassi, A. F. Fragano, A. Patané, M. Capazi, E. Runge, e R. Zimmermann, *Phys. Rev. B* **61**, 10985 (2000), e suas referências.
- [6.14] E. Laureto, E. A. Meneses, W. Carvalho Jr, A. A. Bernussi, E. Ribeiro, E. C. F. Silva, e J. B. B. Oliveira, *Brazilian J. Phys.* **32**, 314 (2002).
- [6.15] I. A. Buyanova, W. M. Chen, G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, H. P. Xin, e C. W. Tu, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 501 (1999).
- [6.16] A. Polimeni, M. Capizzi, M. Geddo, M. Fischer, M. Reinhardt, e A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2870 (2000).
- [6.17] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, L. C. Poças, J. L. Duarte, J. B. B. Oliveira, J. C. Harmand, *J. Appl. Phys.* **93**, 4475 (2003).
- [6.18] A. Kaschner, T. Luttgert, H. Born, A. Hoffmann, A. Y. Egorov, e H. Riechert, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1391 (2001).
- [6.19] D. O. Toginho Filho, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, S. A. Lourenco, L. C. Poças, S. S. Prabhu, J. Klem, *J. Appl. Phys.* **73**, 123702 (2005).
- [6.20] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, e J. C. Harmand, “Temperature-dependent photoluminescence spectra of GaAsSb/AlGaAs and GaAsSbN/GaAs single quantum wells under different excitation intensities” (submetido para publicação; *Mat. Sci. Eng. B*).
- [6.21] Reynolds *Appl. Phys. Lett.* **46**, 51 (1985); Bertol J. *Appl. Phys.* **64**, 6562 (1988); Srinivas, *Phys. Rev. B* **46**, 10193 (1992).

- [6.22] I. V. Ponomarev, L. I. Deych, e A. A. Lisyansky, *Phys. Rev. B* **71**, 155303 (2005).
- [6.23] S. A. Lourenço, “Efeito da composição da liga e das interfaces sobre a variação térmica da energia das transições excitônicas em poços quânticos de materiais III-V”, Tese de doutorado, Londrina, PR, 2004.
- [6.24] A. Bell, S. Srinivason, C. Plumlle, H. Omiya, e A. F. Ponce, *J. Appl. Phys.* **95**, 4670 (2004).
- [6.25] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, D. O. Tuginho Filho, E. A. Meneses, e J. R. Leite, *Eur. Phys. J. B* **2**, 11 (2001).
- [6.26] E. Grilli, M. Guzzi, R. Zamboni, L. Pavesi. *Phys. Rev. B*, **45**, 1638 (1992).
- [6.27] S. Logothetidis, L. Viña, M. Cardona, *Phys. Rev. B* **31**, 947 (1985).
- [6.28] R. Pässler, G. Oelgart, *J. Appl. Phys.* **82**, 2611 (1997).
- [6.29] J. Filipowicz, C. Ghezz, L. Tarricone, *Solid State Commun.* **74**, 533 (1990).
- [6.30] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. Wiegmann, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-20**, 265 (1984).
- [6.31] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, Y. M. Kapoor, F. A. Chambers, B. A. Vojak, J. M. Meese, *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [6.32] D. Bimberg, J. Christen, A. Steckenborn, G. Weimann, W. Schlapp, *J. Lumin.* **30**, 562 (1985).
- [6.33] C. Ghezzi, D. Martin, A. Parisini, J.L. Staehli, L. Tarricone, *Phys. Stat. Sol. (b)* **152**, 101 (1989).
- [6.34] S. Selci, A. Cricenti, M. Righini, C. Petrillo, IV.4- F. Sacchetti, F. Alexandre, G. Chiarotti, *Appl. Surf. Sci.* **55**, 637 (1992).
- [6.35] Lin Der-Yuh, Li Chi-Feng, Huang Ying-Sheng, *J. Appl. Phys.* **35**, 3576 (1996).

- [6.36] Y.S. Huang, H. Qiang, H. Pollak Fred, G.D. Pettit, P.D. Kirchner, J.M. Woodall, S. Hans, B.S. Larry, *J. Appl. Phys.* **70**, 7537 (1991).
- [6.37] Y. Chen, R.L. Cingolani, C. Andreani, F. Bassani, *Nuovo Cimento* **10**, 847 (1988).
- [6.38] R. Kumar, S.S. Prabhu, A.S. Vergurlekar, *Physica Scripta* **56**, 308 (1997).
- [6.39] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **90**, 3956 (2001).
- [6.40] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **200**, 155 (1997).
- [6.41] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, M. Cardona *Phys. Rev. B* **35**, 9174 (1987).
- [6.42] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **216**, 975 (1999).
- [6.43] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 5683 (1982).
- [6.44] K. Hirakawa, H. Sakuki, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 889 (1986).
- [6.45] V. Okuyama, N. Tokuda, *Phys. Rev. B* **40**, 9744 (1989).
- [6.46] G. N. Goltsman, V. Smirnov, *JETP Lett.* **74**, 474 (2001).
- [6.47] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [6.48] E. Matovani, *Comunicação Interna*, 2005.
- [6.49] D. Lürben, R. Bleher, H. Kalt, *Phys. Rev. B* **61**, 15812 (2000).

PARTICIPAÇÃO EM CONGRESSOS, EVENTOS E PUBLICAÇÕES NO PERÍODO DA DISSERTAÇÃO.

I) PUBLICAÇÕES

- 1) *Influência das flutuações das composições químicas das barreiras sobre as formas de linha das recombinações excitônicas em poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, M. A. T. Silva, A. A. Quivy, T. E. Lamas, submetido à Revista Brasileira de Vácuo. (2005)

II) PARTICIPAÇÃO EM CONGRESSOS E EVENTOS

- 1) *Estudo da variação da largura de linha a meia altura (FWHM) com a temperatura em heteroestruturas de poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* . **M. A. T. da Silva**, S. A. Lourenço, E. Laureto, I. F. L. Dias, J. L. Duarte. IX Semana da Física, 8 a 12 de novembro de 2004, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR.
- 2) *Influência da composição da barreira sobre a fotoluminescência dependente da temperatura em poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* . **M. A. T. da Silva**, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, S. A. Lourenço, A. A. Quivy, T. E. Lamas. XXVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 10 a 14 de maio de 2005, Santos, SP.
- 3) *Influência das flutuações das composições químicas das barreiras sobre as formas de linha das recombinações excitônicas em poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$* S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, **M. A. T. Silva**, A. A. Quivy, T. E. Lamas, XXVI CEBRAVIC, 27 a 29 de julho de 2005, Londrina, PR.

III) SEMINÁRIOS PROFERIDOS

- 1) *Meia largura de linha em poços quânticos*. Seminário apresentado no “XIX Ciclo de Seminários do Grupo de Óptica e Optoeletrônica”. Promovido pelo Departamento de Física, realizado no período de março a junho de 2004, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR.
- 2) *Dependência da largura de linha excitônica em poços quânticos*. Seminário apresentado no “XX Ciclo de Seminários do Grupo de Óptica e Optoeletrônica”. Promovido pelo Departamento de Física, realizado no período de março a junho de 2005, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR.
- 3) *Fotoluminescência em poços quânticos*. Seminário apresentado no “XXI Ciclo de Seminários do Grupo de Óptica e Optoeletrônica”. Promovido pelo Departamento de Física, realizado no período de agosto a dezembro de 2005, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR.