



Universidade
Estadual de Londrina

Márcio Daldin Teodoro

**TRANSIÇÕES ÓPTICAS EM POÇOS QUÂNTICOS
MÚLTIPLOS COM DIFERENTES ORIENTAÇÕES
CRISTALOGRÁFICAS**

Márcio Daldin Teodoro

**TRANSIÇÕES ÓPTICAS EM POÇOS QUÂNTICOS
MÚLTIPLOS COM DIFERENTES ORIENTAÇÕES
CRISTALOGRÁFICAS**

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

Orientador: Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias

Co-Orientador: Dr. Pedro Pablo González Borrero

Londrina-PR
2008

Catálogo na publicação elaborada pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da Universidade Estadual de Londrina.

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)

T314t Teodoro, Márcio Daldin.

Transições ópticas em poços quânticos múltiplos com diferentes orientações cristalográficas / Márcio Daldin Teodoro. – Londrina, 2008.
112f. : il. + anexos no final da obra.

Orientador: Ivan Frederico Lupiano Dias.

Co-orientador: Pedro Pablo González Borrero.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2008.

Bibliografia: f.100-112.

1. Ótica – Teses. 2. Física do estado sólido – Teses. 3. Semicondutores – Propriedades óticas – Teses. 4. I. Dias, Ivan Frederico Lupiano. II. González Borrero, Pedro Pablo. III. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas.

Márcio Daldin Teodoro

**TRANSIÇÕES ÓPTICAS EM POÇOS QUÂNTICOS
MÚLTIPLOS COM DIFERENTES ORIENTAÇÕES
CRISTALOGRÁFICAS**

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

Orientador: Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias

Co-Orientador: Dr. Pedro Pablo González Borrero

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Orientador Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias
Universidade Estadual de Londrina

Prof. Dr. Evaldo Ribeiro
Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. José Leonil Duarte
Universidade Estadual de Londrina

Londrina, 19 de Fevereiro de 2008.

Dedicatória

Dedico este trabalho com todo meu carinho e admiração aos meus pais Antonio e Denise e aos meus irmãos Fabio, Marcelo e Ronaldo, pelo apoio incondicional e pelos inestimáveis incentivos que permitiram manter o foco em meu objetivo, me guiando durante toda a jornada. Que hoje possam sentir, ao menos em parte, todo o orgulho que sinto de vocês, e verem que com sua ajuda, conquisto mais um degrau em minha escalada pela vida.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias pela orientação, paciência e incentivo para superar minhas dificuldades.

Ao prof. Dr. Pedro Pablo González Borrero pela co-orientação e amizade desde a iniciação científica.

Ao Dr. Edson Laureto por sua perícia no laboratório, disposição nas discussões e auxílio do trabalho.

Aos Prof. Dr. José Leonil Duarte e Dr. Sidney Lourenço pela colaboração e a valiosas discussões.

Aos amigos da turma de mestrado 2006-2008, Adalberto, Ademar, Cristiane, Daniel, João Lucas, Leonardo, Paulo, Rafael, Ricardo M., Ricardo G. pelo prazer da convivência e por compartilharem o sofrimento em eletrodinâmica e mecânica quântica.

Aos colegas de laboratório, Rômulo, Marco Aurélio, Dari, Gisele, Élder, Therésio e Luiz pelas conversas fiadas.

Ao Prof. Dr. Irineu Mazzaro (UFPR) pelas medidas de Raios-X.

Aos Prof. Dr. Euclides Marega Jr. (IFSC) e Dr. Gregory Salamo (Arkansas – USA) pelo crescimento das amostras.

A Paulo José, Daniel, Fausto, André Naves e Ana Lúcia, amigos de todas e para todas as horas.

A CAPES pelo apoio financeiro.

Durante esse período, aprendi muito com cada um de vocês. A todos o meu reconhecimento.

RESUMO

Neste trabalho estudamos as transições ópticas em poços quânticos múltiplos de GaAs/Al_xGa_{1-x}As, crescidos por epitaxia por feixe molecular sobre os substratos de GaAs orientados nas direções [100], [311]A e [311]B. Os parâmetros estruturais dos poços quânticos foram determinados por Difractometria de Alta Resolução de Raios-X. O estudo das transições ópticas foi realizado pela técnica de fotoluminescência (PL). Através dos resultados obtidos, identificamos os picos dos espectros e analisamos os seus comportamentos em função da temperatura e intensidade de excitação. Utilizando baixas intensidades de excitação, analisamos no intervalo de temperatura de 12 a 120 K o comportamento de éxcitons localizados em flutuações do potencial de confinamento das heteroestruturas. A dependência da energia do pico da PL com a temperatura foi ajustada através da expressão proposta por Pässler [Phys. Status Solidi B, **200**, 155 (1997)] subtraído do termo $\sigma^2 / k_B T$ que considera a presença das flutuações de potencial. Verificamos através da forma de linha, da largura de linha à meia altura dos espectros de PL, dos valores de σ obtidos dos ajustes dos pontos experimentais e dos valores máximos do *blueshift* do pico de PL, que as amostras crescidas nas direções [311]A/B possuem maiores flutuações de potencial em relação às crescidas na direção [100], indicando um maior grau das corrugações superficiais dos MQWs crescidos nas direções [311]. A variação do *gap* de energia com a temperatura foi investigada com intensidades de excitação altas o suficiente para blindar as flutuações de potencial, empregando ajustes pelos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler-ρ. Os parâmetros de ajustes dos diferentes modelos foram analisados em função da orientação do substrato e não apresentaram variações significativas.

ABSTRACT

In this work, the optical emission properties of (100), (311)A and (311)B GaAs/AlGaAs multiquantum wells (MQWs) grown by molecular beam epitaxy have been studied. The structural parameters were determined by High Resolution X-Ray Diffractometry. The optical transitions of these structures have been studied by means of the photoluminescence technique (PL). The study was carried out as a function of temperature, combined with the excitation intensity variation. Using low excitation intensity, in the temperature range of 12 – 120 K, the behavior of exciton localized in the confinement potential fluctuations of the heterostructures has been analyzed. The PL peak-energy dependence with temperature was adjusted by the expression proposed by Pässler [Phys. Status Solidi B, **200**, 155 (1997)] subtracting the term $\sigma_E^2 / k_B T$, which considers the presence of potential fluctuations. It can be verified, from the PL line shape, the full width at half maximum of PL spectra, the σ_E values obtained from the adjustment of experimental points and the blueshift maximum values, that the samples grown in [311]A/B directions have larger potential fluctuation amplitude than the sample grown in [100] direction. This indicates a larger degree of the superficial corrugations for the MQWs grown in [311] direction. The gap energy as a function of temperature has been investigated, keeping the excitation intensity sufficiently high screening the potential fluctuations, using fit by Varshni, Viña, Pässler-p and Pässler- ρ models. The fitting parameters from the different adjusts were analyzed in function of the substrate orientation and have shown no significant variations.

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	01
CAPÍTULO 2 – REVISÃO.....	05
2.1. Os elementos gálio, arsênio e alumínio.....	05
2.2. Os binário GaAs e AlAs e a liga $Al_xGa_{1-x}As$	06
2.2.1. Estrutura cristalina.....	07
2.2.2. Estrutura de bandas do GaAs.....	11
2.2.3. Fônons no GaAs.....	12
2.2.4. Estrutura de bandas do AlAs.....	13
2.2.5. Fônons no AlAs.....	14
2.2.6. A liga $Al_xGa_{1-x}As$	14
2.2.6.a. Parâmetro de rede.....	15
2.2.6.b. <i>Gap</i> de energia.....	15
2.2.7. Fônons no AlGaAs.....	16
2.3. Orientação do substrato de GaAs.....	18
2.4. Heteroestruturas de poços quânticos.....	24
2.4.1. Níveis de energia.....	26
2.4.2. Poço de potencial infinito.....	27
2.4.3. Poço de potencial finito.....	29
2.4.4. Fônons em poços quânticos.....	32
2.5. Propriedades dos poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ crescidos em diferentes orientações cristalográficas.....	34
2.5.1. <i>Offset</i>	34
2.5.2. Massa efetiva.....	35
2.5.3. Sub-banda de energia.....	37
2.6. Flutuação de potencial.....	38
CAPÍTULO 3 – MODELOS DE AJUSTE.....	44
3.1. Introdução.....	44
3.2. Modelo de Varshni.....	45

3.3. Modelo de Viña.....	46
3.4. Modelo de Pässler-p.....	47
3.5. Modelo de Pässler-p.....	48
3.6. Análise comparativa entre os modelos de ajustes.....	49
3.7. Modelos de ajuste para sistemas com flutuações de potencial.....	50
CAPÍTULO 4 – TÉCNICAS EXPERIMENTAIS.....	55
4.1. Epitaxia por Feixe Molecular.....	55
4.2. Difratomia de Raios-X de Alta Resolução.....	56
4.3. Fotoluminescência.....	58
4.4. Processos físicos envolvidos na fotoluminescência.....	58
4.4.1. Transições em semicondutores <i>bulk</i>	59
4.4.1.a. Emissão de éxcitons livres.....	59
4.4.1.b. Transição banda a banda.....	61
4.4.1.c. Transição envolvendo éxcitons ligados.....	61
4.4.1.d. Transição banda-impureza.....	62
4.4.1.e. Recombinação doador-aceitador.....	62
4.4.2. Transições excitônicas no poço quântico.....	63
4.5. Descrição das amostras utilizadas.....	65
4.6. Descrição do arranjo experimental da técnica de fotoluminescência.....	67
CAPÍTULO 5 – RESULTADOS E DISCUSSÃO: GaAs e AlGaAs VOLUMÉTRICOS.....	69
5.1. GaAs <i>bulk</i>	69
5.2. AlGaAs <i>bulk</i>	70
5.2.1. Análise das transições banda a banda.....	74
5.2.2. Análise das transições envolvendo impurezas na orientação [100].....	74
5.2.3. Análise das transições envolvendo impurezas nas orientações [311].....	75
5.3. Conclusões parciais.....	77
CAPÍTULO 6 – RESULTADOS E DISCUSSÃO: POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS.....	78
6.1. Espectros de PL dos MQWs a 12 K.....	78

6.2. Resultados experimentais para baixas intensidades de excitação.....	79
6.3. Resultados experimentais para altas intensidades de excitação.....	82
6.4. Discussão dos resultados experimentais para baixas intensidades de excitação.....	84
6.4.1. Ajustes das curvas de E_g x T com <i>blueshift</i> em baixas temperaturas.....	86
6.5. Ajustes dos pontos experimentais para altas intensidades de excitação.....	89
6.5.1. Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de ajustes para altas intensidades de excitação.....	93
6.6. Conclusões parciais.....	95
CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES.....	97
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	100
ARTIGOS PUBLICADOS, ACEITOS E TRABALHOS APRESENTADOS.....	113

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Desde a invenção do transistor em 1947 por Willian Shochley, John Bardeen e Walter Brattain (Nobel de 1956), os dispositivos baseados em materiais semicondutores protagonizaram uma revolução na ciência e tecnologia. A criação dos primeiros dispositivos baseados em semicondutores, como circuitos integrados, em 1960, desenvolvimento da memória do tipo DRAM, em 1967, e a criação do primeiro microprocessador, em 1971, permitiram a construção dos computadores como os conhecemos hoje ^[1.1]. Embora os dispositivos semicondutores baseados no silício cristalino tenham conquistado sua posição como material líder na classe de materiais eletrônicos, outros semicondutores como o arseneto de gálio (GaAs) desempenham atualmente na opto-eletrônica papel equivalente ao sílico na microeletrônica ^[1.1].

Gordon Moore, um dos fundadores da Intel, previu em 1965 que a cada 18 meses o número de transistores em um circuito integrado dobraria. De fato, a miniaturização dos componentes eletrônicos levou a microeletrônica a atingir o nível quântico. Neste regime, as estruturas possuem dimensões entre 10 e 100 nm. A miniaturização dos dispositivos e a construção de estruturas em escala nanométrica foram possíveis graças ao desenvolvimento de técnicas de crescimento com precisão atômica. Dentre essas técnicas destaca-se a Epitaxia por Feixe Molecular MBE (do inglês *Molecular Beam Epitaxy*). Um exemplo de sofisticação alcançada na fabricação de nanoestruturas é o efeito Hall quântico fracionário, descoberto em 1982 em uma heteroestrutura de camadas alternadas de GaAs e AlGaAs produzidas por MBE que rendeu o Nobel de 1998 a Daniel Tsui e a Horst Störmer.

A técnica de MBE é utilizada com sucesso na preparação de materiais semicondutores volumétricos e heteroestruturas de camadas alternadas de semicondutores distintos, consistindo na deposição de elementos químicos sobre um substrato aquecido a algumas centenas de graus Celsius, em uma câmara de ultra-alto-vácuo. Com a técnica de RHEED (do inglês *Reflection High-Energy Electron Diffraction*) é possível monitorar o crescimento em tempo real, conferindo confiabilidade em escala atômica para o valor das espessuras, composição, morfologia e cristalinidade das camadas crescidas ^[1.2]. O controle preciso da quantidade de material depositado possibilitou o crescimento de estruturas com dimensões inferiores ao comprimento de onda de *de Broglie* do elétron, dando origem à quantização dos níveis de energia devido aos efeitos de confinamento. As estruturas produzidas são chamadas de estruturas de baixa dimensionalidade,

sendo bidimensionais (2D), unidimensionais (1D) e zero – dimensionais (0D) quando o movimento dos portadores de carga fica confinado, respectivamente, em uma, duas ou três direções.

Um exemplo de heteroestrutura que contém camadas de diferentes materiais crescidos sobre uma base cristalina, é o poço quântico QW (do inglês *Quantum Well*), que é formado pelo crescimento de um semiconductor intercalado entre outros dois semicondutores com *gap* de energia maior em relação ao primeiro. O material com *gap* de energia maior constitui a barreira, e o semiconductor com *gap* de energia menor forma o poço, propiciando assim uma região de confinamento bidimensional dos portadores de carga com propriedades características e distintas dos materiais volumétricos que compõem o poço e a barreira. Esse tipo de heteroestrutura permite o estudo de uma série de fenômenos físicos, como o efeito Stark de confinamento quântico ^[1.3], o efeito Hall quântico ^[1.4], e o comportamento excitônico (estruturas geradas pela interação coulombiana entre elétrons e buracos). Em poços formados pelas ligas GaAs/AlGaAs as transições excitônicas são predominantes até a temperatura ambiente devido ao aumento da energia de ligação excitônica resultante do confinamento. Este é um dos principais motivos para a aplicação de poços quânticos em opto-eletrônica, como na construção de fotodiodos, células solares, *lasers*, etc.

O estudo do comportamento do *gap* de energia (E_g) em função da temperatura em materiais volumétricos e heteroestruturas semicondutoras é de fundamental importância na física básica e na aplicação de dispositivos opto-eletrônicos. É conhecido que a interação elétron-fônon e a expansão térmica da rede são os mecanismos responsáveis pela variação do *gap* com a temperatura. Existem vários modelos que ajustam os pontos experimentais de $E_g(T)$, como os propostos por Varshni ^[1.5], Viña ^[1.6] e os de Pässler ^[1.7 - 1.14]. Dos ajustes dos pontos experimentais por estes modelos, é possível extrair uma série de informações sobre as propriedades de heteroestruturas semicondutoras, como o *gap* de energia a 0 K, intensidade da interação elétron-fônon, energia dos fônons, etc.

Mesmo com o grande avanço nas técnicas de crescimento, é inevitável a presença de flutuações nas larguras dos poços e na composição química dos elementos que compõem a barreira. Em baixas temperaturas e para baixas intensidades de excitação, essas flutuações modulam o perfil do potencial de confinamento afetando as transições excitônicas e as propriedades ópticas do material ^[1.15]. Isto leva a um comportamento da curva de $E_g(T)$, a baixas

temperaturas, diferente daquele previsto pelos modelos de ajustes citados. Com a fotoexcitação, os portadores podem relaxar através da interação com fônons aos mínimos do potencial de confinamento antes de ocorrer à recombinação radiativa. Com o aumento da temperatura, os portadores são excitados termicamente para regiões de maiores energias levando a uma blindagem gradual das flutuações de potencial. A partir de determinada temperatura, as flutuações são completamente blindadas, e então, a energia do *gap* passa a diminuir devido à interação elétron-fônon e expansão térmica da rede ^[1.6, 1.8, 1.16]. Diversos estudos teóricos e experimentais têm descrito esses mecanismos através de um termo $\sigma^2/k_B T$ associado aos modelos de ajustes da variação do *gap* de energia com a temperatura, onde σ representa o desvio padrão da distribuição gaussiana das flutuações de potencial ^[1.17 - 1.22].

A escolha da orientação do substrato no qual será feito o crescimento de um poço quântico influencia diretamente nas propriedades elétricas, ópticas e morfológicas dessa heteroestrutura. Os estudos realizados em poços quânticos, entretanto, têm sido feitos geralmente na direção [100]. A preparação de estruturas em diferentes orientações provoca anisotropia na massa efetiva dos buracos pesados, gera campos piezoelétricos, modifica as estrutura de bandas e ainda pode levar à formação de rugosidade nas interfaces dos materiais ^[1.23 - 1.32]. Alguns destes fatores podem propiciar a criação de dispositivos opto-eletrônicos com desempenho superior aos preparados na direção convencional [100], como ocorre atualmente na construção de *lasers* de estado sólido.

De todas as superfícies possíveis de serem escolhidas, as superfícies (311)A e (311)B têm atraído atenção nas duas últimas décadas ^[1.33 - 1.40]. Estas superfícies exibem propriedades físicas intermediárias entre a superfície (100) e a superfície (111). Existem diversas razões que levam ao grande interesse na utilização destas orientações no crescimento de materiais semicondutores, entre eles: alta condutividade no GaAs (311)A dopado com silício pelo controle da temperatura de crescimento e da razão dos fluxos de Ga/As, enquanto se mantém uma alta qualidade cristalina ^[1.41, 1.42]; fabricação ideal para fios quânticos ^[1.43]; preparação de arranjos uniformes de pontos quânticos ^[1.44, 1.45]; alta mobilidade de gás de buracos bi-dimensional em poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos na superfície (311)A usando Si como aceitador ^[1.46].

Neste trabalho estudamos poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos nas orientações [100], [311]A e [311]B dos substratos de GaAs. O crescimento foi realizado simultaneamente por MBE. Os parâmetros estruturais dos poços foram determinados por Difractometria de Alta

Resolução de Raios-X, e as propriedades ópticas foram estudadas pela técnica de Fotoluminescência. Discutimos as propriedades ópticas do GaAs *bulk* constituinte da camada *buffer*, do AlGaAs volumétrico das barreiras, e das transições excitônicas nos poços quânticos, em função da intensidade de excitação e da variação de temperatura. Os resultados obtidos são avaliados em função das orientações dos substratos.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 fazemos uma revisão sobre as estruturas cristalinas, estrutura de bandas e fônons nos binários GaAs e AlAs e na liga AlGaAs. Na seqüência é feito um estudo detalhado sobre as configurações das ligações químicas em diferentes orientações do substrato de GaAs. Realizamos ainda um estudo sobre a influência da orientação do substrato sobre as propriedades ópticas dos poços quânticos. No final do capítulo, descrevemos os efeitos das flutuações de potencial em QW de GaAs/AlGaAs. No capítulo 3 apresentamos os modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler-ρ para o ajuste do *gap* de energia em função da temperatura, e o modelo matemático que descreve a variação do *gap* de energia com a temperatura em sistemas com flutuações de potencial. No capítulo 4 descrevemos as técnicas experimentais utilizadas neste trabalho e os princípios físicos da técnica de fotoluminescência. O capítulo 5 é destinado à apresentação dos resultados experimentais e discussão das transições ópticas observadas no binário GaAs e na liga AlGaAs em todas as orientações. O capítulo 6 é dedicado à análise e discussão dos resultados experimentais obtidos dos poços quânticos em função da orientação do substrato e finalmente no capítulo 7 apresentamos as conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO 2 – REVISÃO

Neste capítulo fazemos uma breve revisão sobre os elementos gálio, arsênio, alumínio, os binários arseneto de gálio e arseneto de alumínio, e a liga ternária arseneto de gálio-alumínio e heteroestruturas de poços quânticos formados por estes materiais e ligas. Mostramos em detalhes como as configurações geométricas das ligações químicas variam entre as diferentes orientações cristalográficas do substrato de GaAs, e as implicações destas orientações nas propriedades ópticas de poços quânticos de GaAs/AlGaAs.

2.1. Os elementos gálio (Ga), arsênio (As) e alumínio (Al)

O gálio foi descoberto por Lecoq de Boisbaudran em 1875 utilizando técnica de espectroscopia. As propriedades deste elemento já haviam sido previstas 4 anos antes de sua descoberta por Mendeleev, baseando-se na posição que deveria ocupar na tabela periódica. O gálio possui número atômico 31 com 39 nêutrons em sua forma isotópica mais estável. Pertence ao grupo IIIA da tabela periódica, é encontrado principalmente na forma de CuGaS_2 (galita) e $\text{Ga}(\text{OH})_3$ (sohngeita), não sendo encontrado livre na natureza. À temperatura ambiente encontra-se no estado líquido e tem ponto de fusão de 28,76 °C e ebulição de 2174 °C. Em condições normais, a estrutura mais estável do gálio é da forma ortorrômbica simples, com 8 átomos em cada célula unitária, sendo a distância entre os primeiros vizinhos de 2.44 Å e de 2.83 Å entre os segundos. As ligações químicas formadas nessa estrutura são do tipo covalente, sendo a molécula de Ga_2 a que realmente forma o retículo cristalino. A configuração eletrônica no estado neutro é $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^1$, possuindo assim, três elétrons de valência ($4s^2 4p^1$) [2.1].

O arsênio é conhecido e utilizado pelo homem desde tempos remotos, e foi estudado detalhadamente por George Brandt em 1633. O arsênio é um semimetal pertencente ao grupo VA da tabela periódica, com número atômico 33 e 42 nêutrons na forma mais estável. É encontrado principalmente na forma de FeSAs (arsenopirita), As_2S_3 (orpimenta), CoSAs (cobaltina) e As_2O_3 (arsenolita), sendo raramente encontrado na forma livre na natureza. À temperatura ambiente encontra-se no estado sólido com ponto de fusão em 814 °C.

Existem três estados alotrópicos do As. O primeiro chamado de arsênio cinza metálico (forma α) é a forma mais estável em condições normais, e possui estrutura romboédrica com 8

átomos na célula unitária, sendo um mau condutor elétrico e um bom condutor de calor. Ao reagir com o ar, perde sua característica metálica. O segundo estado, conhecido como arsênio amarelo (forma γ) é obtido quando o vapor de arsênio (As_4) é esfriado rapidamente. Extremamente reativo e volátil, reverte à forma estável (cinza) quando exposto a luz ou calor. No estado sólido, assume estrutura cúbica. A última forma, denominada arsênio negro, (forma β) tem propriedades intermediárias entre os outros dois estados. Possui estrutura hexagonal e é obtido a partir da decomposição térmica da arsina ou esfriando lentamente o vapor de arsênio. A configuração eletrônica do arsênio no estado neutro é $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^3$, possuindo cinco elétrons de valência ^[2.1].

O metal mais abundante na crosta terrestre é o alumínio. Utilizado desde os tempos greco-romanos, seu isolamento ocorreu em 1827 por Friedrich Wöhler. Possui número atômico 13 com 14 nêutrons na forma mais estável e pertence ao grupo IIIA. Por ser altamente reagente com o oxigênio do ar, não ocorre na forma livre, e é encontrado principalmente na forma de óxidos. Em temperatura ambiente encontra-se no estado sólido, com estrutura do tipo cúbica de face centrada. É maleável, leve, resistente, não magnético, bom condutor de calor e eletricidade, resistente à corrosão e uma série de outras características que têm feito deste elemento um dos mais utilizados nas mais diversas aplicações, desde fabricação de utensílios domésticos até a indústria aeroespacial e na construção de micro chips em escala nanométrica. Sua configuração eletrônica é $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$, possuindo três elétrons de valência ^[2.1].

2.2. Os binários GaAs e AlAs e a liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Com a junção dos elementos gálio, arsênio e alumínio é possível construir os binários arseneto de gálio (GaAs) e arseneto de alumínio (AlAs), e o ternário arseneto de gálio-alumínio (AlGaAs). O GaAs foi reconhecido como um semicondutor de performance superior ao silício no final da década de 70, e é empregado nas indústrias de telecomunicações, espacial, bélica e optoeletrônica. Com a superposição adequada de ligas binárias e ternárias é possível a construção de heteroestruturas, que demonstram enorme versatilidade em aplicações de alta tecnologia, como na construção de lasers de estado sólido. Contudo, as propriedades elétricas e ópticas de materiais semicondutores são dependentes da orientação cristalina do substrato sobre o qual são crescidos. A orientação do substrato influencia diretamente nas condições de crescimento, energias de

transições, incorporação de dopantes e na qualidade das interfaces das heteroestruturas, permitindo a criação de dispositivos opto-eletrônicos com performance superior aos preparados na direção convencional [100], como ocorre atualmente na construção de lasers de estado sólido [2.2, 2.3].

2.2.1. Estrutura cristalina

Materiais semicondutores III-V como GaAs, AlAs e AlGaAs, cristalizam-se em uma estrutura denominada *zinc-blend*, que consiste de duas redes cúbicas de faces centradas interpenetradas e deslocadas ao longo 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 da célula convencional, e cada átomo de Ga ou Al tem quatro átomos de As como vizinhos próximos e vice-versa [2.4]. A Figura 2.1 fornece os detalhes da estrutura de uma célula convencional *zinc-blend*. Na Figura 2.2 mostramos estruturas do GaAs em três dimensões sob diversos ângulos para melhor visualização da configuração espacial dos átomos [2.5].

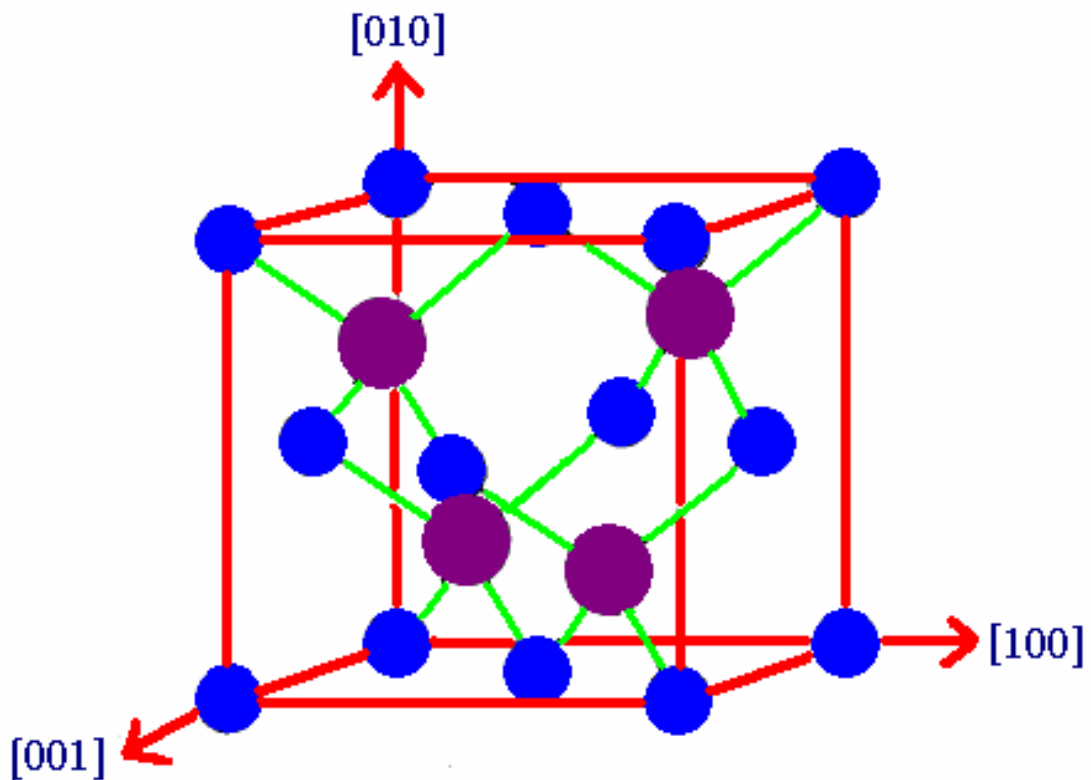


Figura 2.1. Estrutura cristalina *zinc-blend* para semicondutores III-V. As esferas azuis representam átomos de gálio, e as roxas átomos de arsênio para o caso do GaAs. No AlAs as azuis representam o alumínio [2.4].

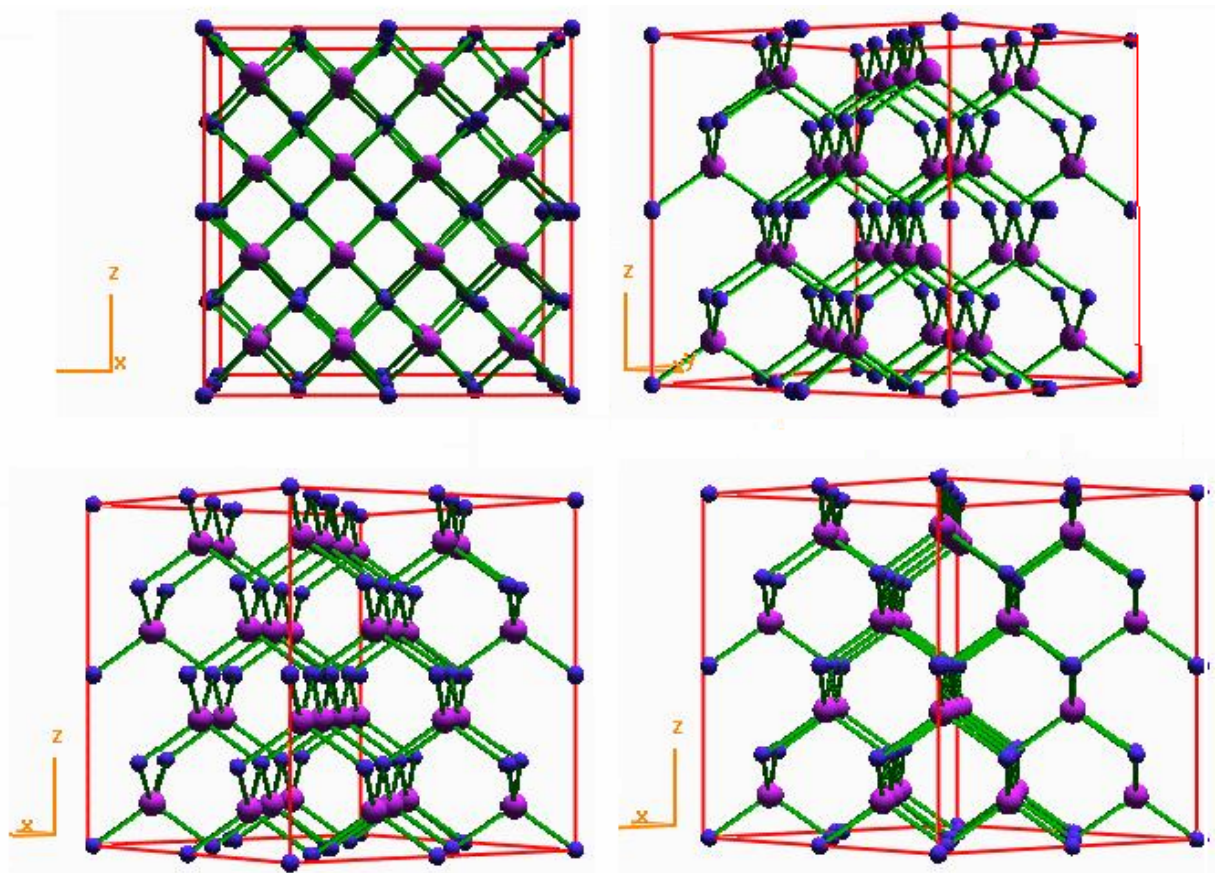


Figura 2.2. Estrutura do GaAs em três dimensões com diferentes rotações ^[2.5].

Na Figura 2.3 mostramos os planos (110), (111) e (311), que determinam diferentes configurações atômicas em relação ao plano convencional (100) ^[2.4].

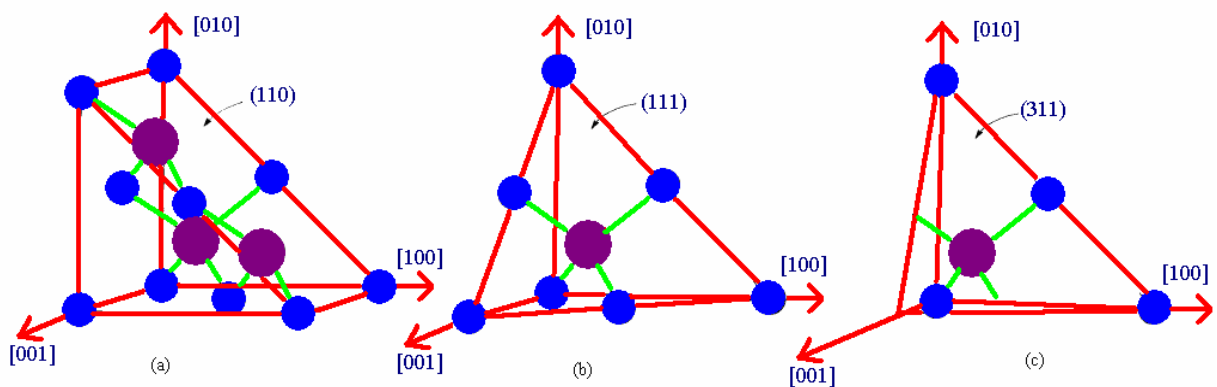


Figura 2.3. Planos nas superfícies (a) (110), (b) (111) e (c) (311) do GaAs ^[2.4].

Para a direção de crescimento [100], a célula unitária é composta por duas monocamadas (ML - do inglês *MonoLayer*), onde uma monocamada é definida como a metade do parâmetro de

rede, ou uma camada de gálio mais uma camada de arsênio. O valor de uma ML é calculado pela expressão da distância entre os planos atômicos:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (2.1)$$

onde d é a distância entre os planos e h , k e l são os índices de Müller. Para o GaAs o valor do parâmetro de rede da célula convencional é 5,6535 Å. Uma ML na direção [100] possui o valor de 2,83 Å, na direção [111] de 3,26 Å e na [311] o valor é de 1,7 Å.

Na Figura 2.4 ilustramos os átomos constituintes de estruturas formadas pelos semicondutores III-V arranjados em tetraedros regulares, com ligações hibridizadas do tipo sp^3 [2.6]. O arseneto de gálio apresenta ligações químicas simples e duplas do tipo covalente, como representado na Figura 2.5, onde o gálio e arsênio possuem 3 e 5 elétrons para compartilhar, respectivamente. Nas ligações duplas existe a falta de um elétron do gálio, assim o arsênio compartilha seus dois elétrons restantes para completar o octeto. Este tipo de ligação é chamado de ligação covalente coordenada ou dativa. A ligação covalente coordenada não é diferente da covalente normal. Os termos “normal” e “coordenada” são utilizados apenas para indicar a origem do par de elétrons compartilhados [2.1].

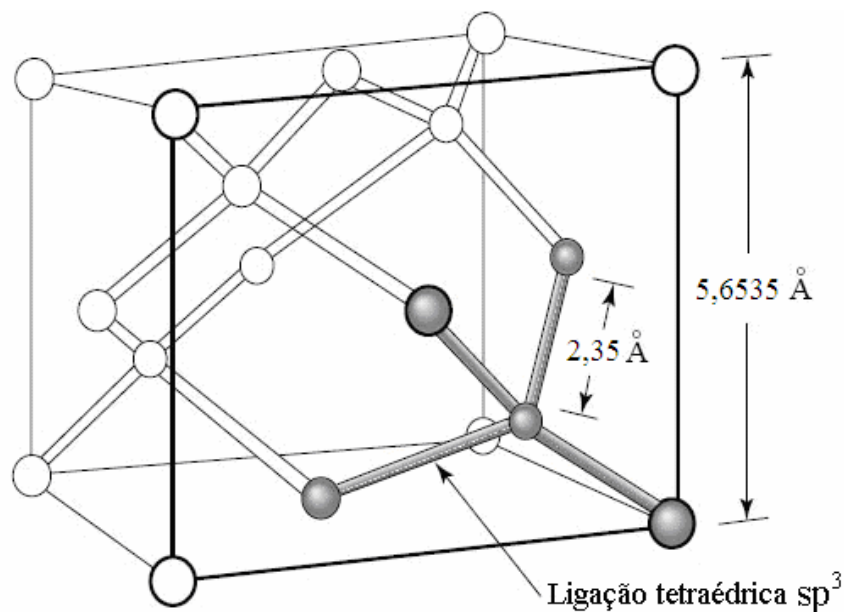


Figura 2.4. Ligação tetraédrica sp^3 em semicondutores III-V destacada em cinza. A distância entre os primeiros vizinhos é de 2,35 Å. 5,6535 Å é o valor do parâmetro de rede da célula convencional do GaAs. As esferas maiores representam átomos de gálio e as menores átomos de arsênio [2.6].

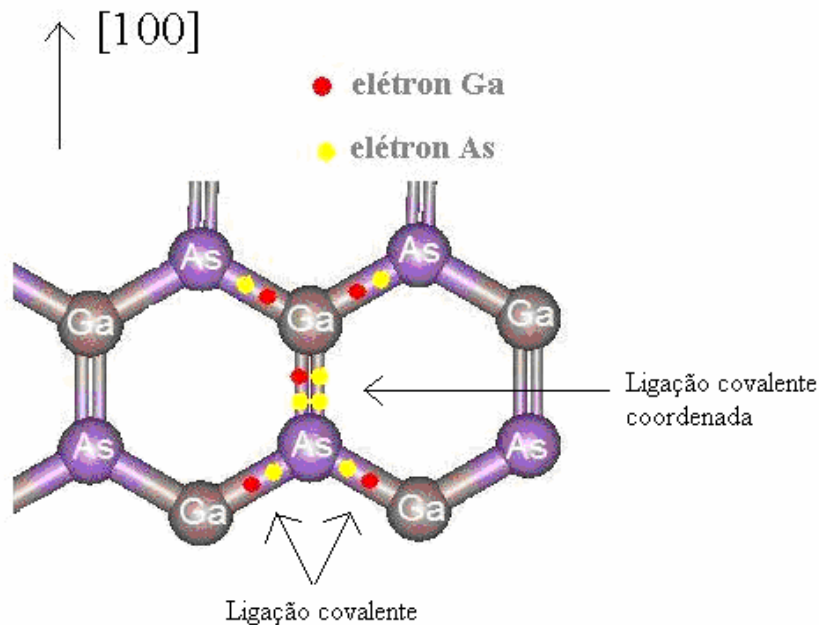


Figura 2.5. Ligações simples e duplas do GaAs. É mostrado em detalhe o compartilhamento dos elétrons entre átomos de Ga e As formando as ligações covalente e covalente coordenada.

Outro ponto importante é a diferença de eletronegatividade entre o gálio e o arsênio. Eletronegatividade é definida como a propriedade que mede a tendência de um átomo, em uma molécula, em atrair elétrons. Na Figura 2.6 mostramos o resultado do cálculo da densidade eletrônica para o GaAs. As regiões vermelhas e azuis representam altas e baixas densidades eletrônicas respectivamente, e as esferas verdes representam átomos de As e as amarelas átomos de Ga. O arsênio é mais eletronegativo que o gálio, portanto, a distribuição de densidade eletrônica é mais concentrada sobre os átomos de As ^[2.7].

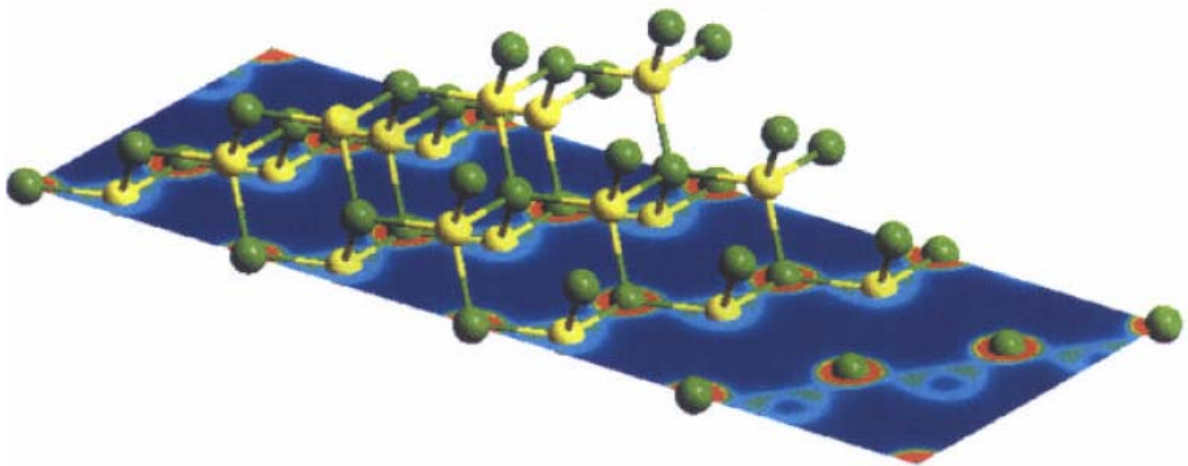


Figura 2.6. Densidade eletrônica para o GaAs, onde as regiões em vermelho são regiões de alta densidade eletrônica e as regiões azuis são de baixa densidade. Esferas verdes representam átomos de As, e amarelas de Ga ^[2.7].

2.2.2. Estrutura de bandas do GaAs

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 2.7 apresentamos a primeira zona de Brillouin e alguns pontos de alta simetria [2.4].

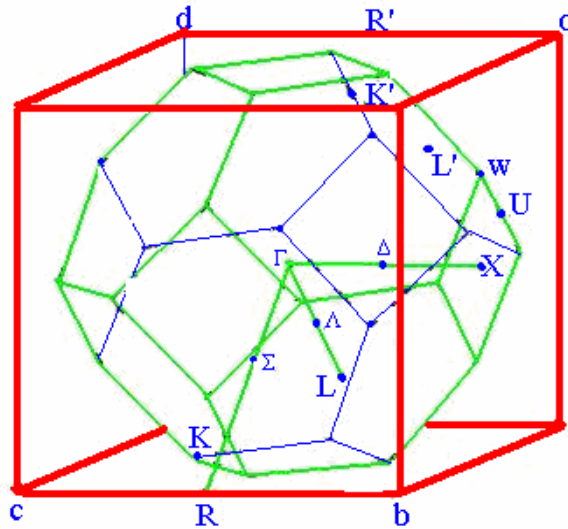


Figura 2.7. Primeira zona de Brillouin da rede cúbica de face centrada com os pontos de alta simetria [2.4].

Na Figura 2.8 mostramos a estrutura de banda eletrônica do GaAs na direção [100]. O mínimo da banda de condução (BC) e o máximo da banda de valência (BV) estão localizados no mesmo ponto de alta simetria Γ ($\vec{k} = 0$) da zona de Brillouin. Na ausência de acoplamento spin-órbita, as três bandas de valência são degeneradas no ponto Γ ($\vec{k} = 0$). O acoplamento spin-órbita levanta esta degenerescência em seis níveis que originam o quadrupletto (simetria Γ_8) e o dupletto (simetria Γ_7). Em semicondutores III-V o quadrupletto tem sempre energia maior que o dupletto, e a separação de energia entre eles é representada pelo símbolo Δ . Em torno de $\vec{k} = 0$ os estados de buracos apresentam curvaturas diferentes. A diferença na curvatura destes estados, de acordo com a definição de massa efetiva $1/m^* = (1/\hbar^2)d^2E(\vec{k})/d\vec{k}^2$, faz com que as massas efetivas dos buracos que ocupam tais estados sejam distintas. Os buracos de maior massa são denominados buracos pesados “hh” (do inglês *heavy hole*), e os buracos de massa menor são chamados de buracos leves “lh” (do inglês *light hole*). A transição fundamental para materiais III-

V de *gap* direto envolve o máximo da banda de valência em Γ_8^V e o mínimo 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 [2.4]. No GaAs *bulk*, no ponto de simetria Γ os estados de buracos apresentam a mesma energia, ou seja, são degenerados. Por esta razão, as transições entre elétrons e buracos (livres ou ligados) ocorrem entre os níveis de elétrons e níveis de buraco pesado, pois não se distingue buracos leves de pesados em virtude desta degenerescência.

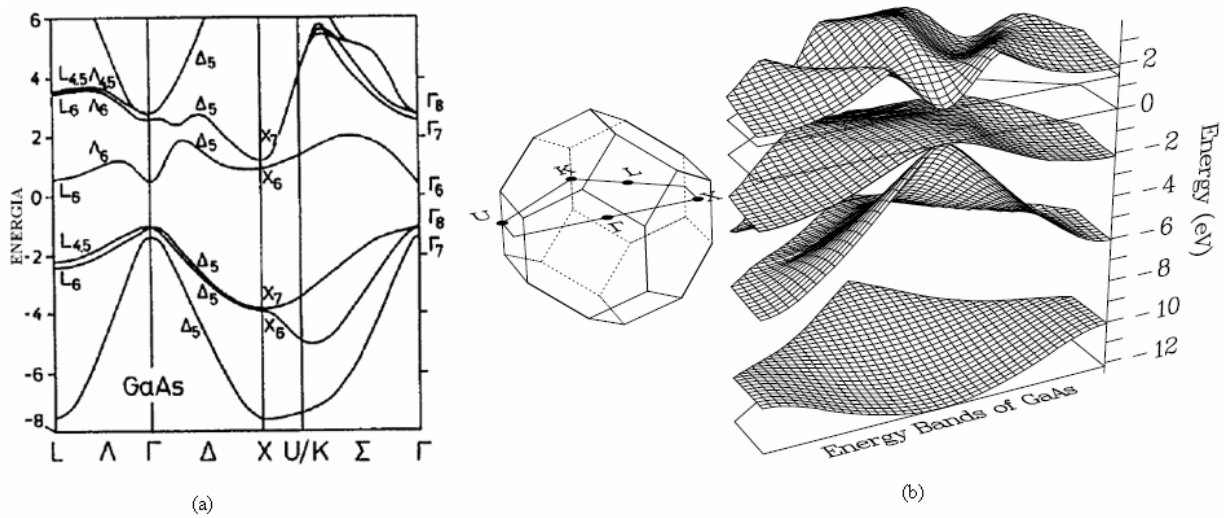


Figura 2.8.(a) Estrutura de bandas do GaAs no espaço dos momentos. (b) Estrutura de bandas em três dimensões [2.4].

2.2.3. Fônons no GaAs

Fônon é um quantum de energia de vibração da rede. Existem dois ramos de fônons chamados de fônons acústicos e fônons ópticos. Estes por sua vez, podem ser longitudinais ou transversais. Uma das técnicas utilizadas no estudo de fônons é a técnica de espalhamento Raman.

Dentre os diversos mecanismos responsáveis pela dependência do *gap* de energia com a temperatura, o principal é a interação elétron-fônon. No caso do GaAs, as interações elétron-fônon que induzem o decréscimo do *gap* com a temperatura estão associadas aos fônons acústicos longitudinais (LA) e aos fônons ópticos longitudinais (LO). Os fônons longitudinais acústicos fornecem a contribuição preponderante [2.8 - 2.10].

Na Figura 2.9 mostramos as curvas de dispersão de fônons para o GaAs. Existem dois ramos ópticos, um longitudinal (LO) (maior energia) e dois transversais (TO) com energias

degeneradas no ponto Γ . Abaixo do ramo óptico está o ramo acústico, com menor energia e amplitude diferente de zero fora do ponto Γ . A densidade de estados dos fônons pode ser vista ao lado, com uma amplitude maior para os fônons ópticos.

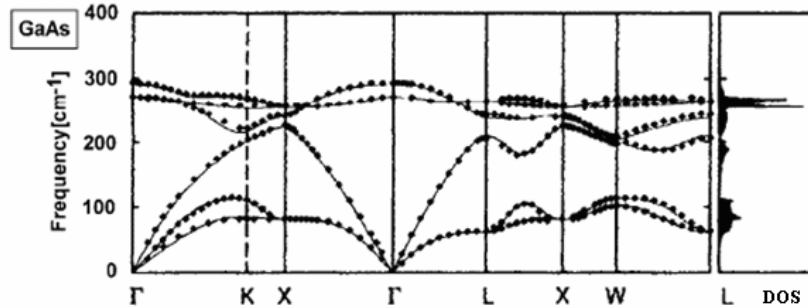


Figura 2.9. Curvas de dispersão de fônons do GaAs, calculadas pela teoria de densidade funcional perturbada, e a densidade de estados (DOS), respectivamente [2.11]. Os círculos cheios são dados experimentais do GaAs obtidos por espalhamento de nêutrons [2.12].

2.2.4. Estrutura de bandas do AlAs

A estrutura de bandas do AlAs muda significativamente em relação ao GaAs, como pode ser observado na Figura 2.10. O extremo da banda de valência está no ponto Γ_8^V , e o mínimo da banda de condução encontra-se no ponto X_6 , ou seja, os máximos e mínimos das bandas de valência e condução não estão no mesmo ponto de simetria. Materiais semicondutores com esta estrutura de banda são ditos terem *gap* indireto. No AlAs $E_g = 2,24$ eV em $T = 0$ K e 2,16 eV para $T = 300$ K [2.4].

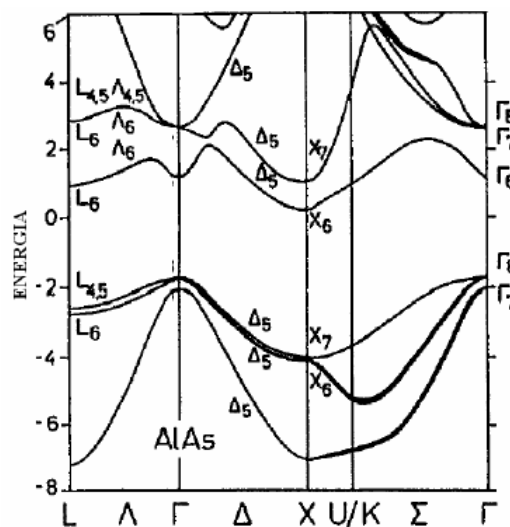


Figura 2.10. Estrutura de bandas do AlAs no espaço dos momentos [2.4].

2.2.5. Fônons no AlAs

A relação de dispersão dos fônons do GaAs é bem conhecida, mas o mesmo não acontece para o AlAs. Isso ocorre porque esta liga é altamente reativa com o oxigênio, dificultando a obtenção adequada de cristais puros para um estudo sistemático. Métodos teóricos têm sido empregados para o cálculo da relação de dispersão do GaAs, e os mesmos são aplicados para inferir os ramos de dispersão do AlAs [2.11, 2.13]. Na Figura 2.11 é apresentada a relação de dispersão dos fônons no AlAs. Observa-se nesta figura dois modos ópticos transversais degenerados no ponto Γ e um modo óptico longitudinal de maior energia. Em torno de 250 cm^{-1} há um *gap* que separa os ramos ópticos dos acústicos. No GaAs os fônons ópticos possuem frequência média de 250 cm^{-1} ($\sim 31 \text{ meV}$). Para o AlAs esta frequência está em torno de 380 cm^{-1} ($\sim 43,3 \text{ meV}$). Assim, a energia dos fônons ópticos do AlAs é, em média, maior que para o GaAs. As relações de dispersão dos fônons acústicos são semelhantes entre essas ligas.

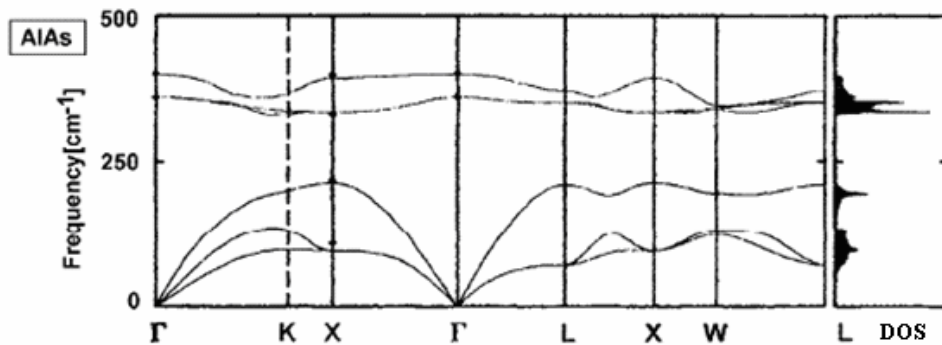


Figura 2.11. Curvas de dispersão de fônons do AlAs, calculadas pela teoria de densidade funcional perturbada, e densidade de estados [2.11].

2.2.6. A liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

A liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ exibe propriedades intermediárias entre os binários GaAs e AlAs. Vários parâmetros, como a constante de rede, a constante dielétrica, a massa efetiva dos portadores de carga, o *gap* de energia, a frequência de oscilação dos fônons, etc, dependem da concentração de alumínio (x). Estes parâmetros podem ser obtidos por meio de interpolação simples, como função linear dos parâmetros dos compostos binários (Lei de Vegard) acrescentando-se, em alguns deles (o *gap* por exemplo) 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.

2.2.6.a. Parâmetro de Rede

O parâmetro de rede da liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$ é obtido pela interpolação linear simples:

$$a^{AlGaAs}(x) = 5,6535 + 0,0094x \quad (2.2)$$

Desta equação, obtém-se que o descasamento de rede entre GaAs e AlAs é de apenas 0,17 % a 300 K [2.4], o que torna o crescimento de interfaces compostas por estas ligas livres de efeitos de tensão (*strain*).

2.2.6.b. Gap de Energia

A dependência do *gap* de energia com a concentração de alumínio na liga de $Al_xGa_{1-x}As$ é calculada por:

$$E_g^{AlGaAs}(x) = xE_g^{AlAs} + (1-x)E_g^{GaAs} - x(1-x)C^{AlGaAs}, \quad (2.3)$$

onde C^{AlGaAs} é a constante de *bowing*. Considerando os valores dos termos de *bowing* obtidos por S. Adachi [2.14] para os vales Γ , X, L da banda de condução, obtemos a dependência do *gap* de energia (em meV) em função da concentração de alumínio a 300 K de acordo com:

$$\begin{aligned} E_g^\Gamma &= 1420 + 1155x + 370x^2 \\ E_g^X &= 1910 + 5x + 245x^2 \\ E_g^L &= 1710 + 690x \end{aligned} \quad (2.4a)$$

E a 2 K, obtém-se:

$$\begin{aligned} E_g^\Gamma &= 1519.2 + 1420x + 370x^2 \\ E_g^X &= 1987 + 3x + 245x^2 \\ E_g^L &= 1815 + 690x \end{aligned} \quad (2.4b)$$

Existem diferentes expressões para o cálculo do *gap* de energia, em função da dispersão de valores encontrados para os termos de *bowing* e para os diferentes valores de *gap* obtidos por diferentes técnicas [2.4, 2.14, 2.15].

Na Figura 2.12 mostramos a dependência do *gap* de energia da liga de AlGaAs em função da concentração de alumínio, para os vales Γ , L e X a 300 K [2.16].

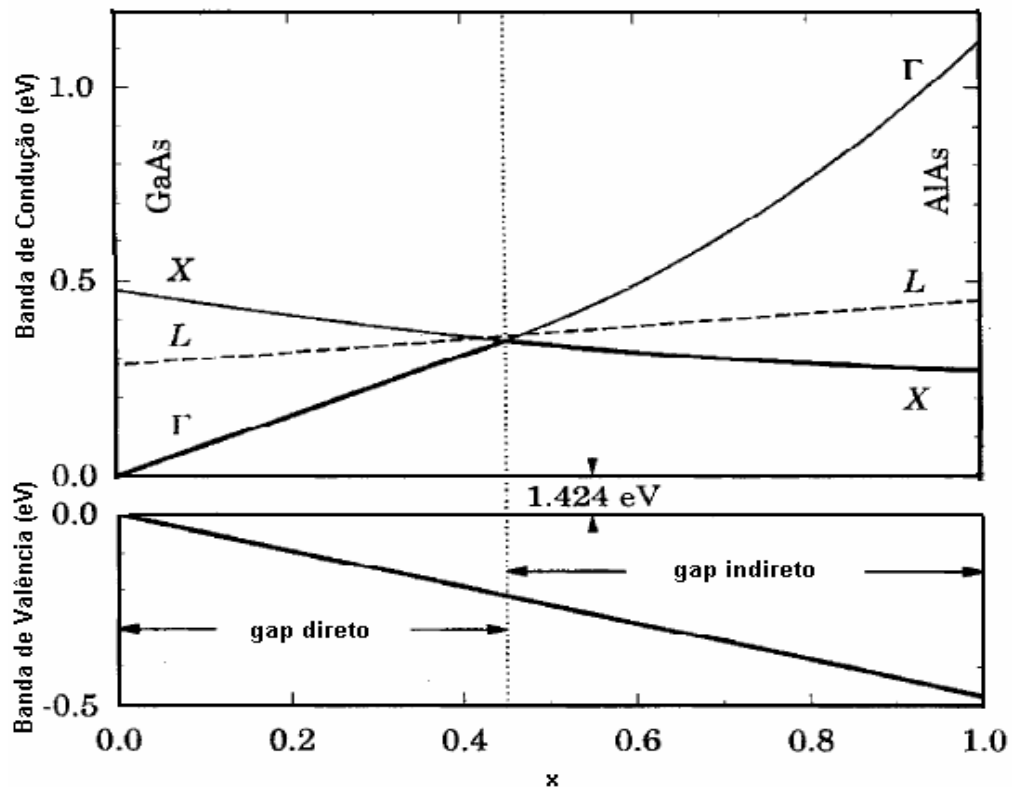


Figura 2.12. Variação da energia de *gap* do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com a concentração de alumínio para os vales Γ , X , L [2.16].

Para regiões entre $0 < x < 0,45$ o *gap* é direto (o vale X está acima do vale Γ), e para regiões com $x > 0,45$ o *gap* é indireto (o vale X está abaixo do vale Γ) [2.4, 2.17, 2.18].

2.2.7. Fônons no AlGaAs

Ligas ternárias semicondutoras do tipo $\text{A}_{1-x}\text{B}_x\text{C}$ são divididas em duas classes de acordo com o comportamento dos ramos dos fônons ópticos localizados próximos ao centro da Zona de Brillouin em função da composição química da liga. Na primeira classe, as frequências dos fônons TO e LO variam de forma aproximadamente linear com a fração molar da liga. Na segunda, os modos dos fônons possuem bandas de energia próximas às dos binários AC e BC que

compõem a liga, que são identificados por fônons do tipo-AC e fônons do tipo-BC ^[2.19]. A maioria das ligas formadas pelos elementos III-V comporta-se de acordo com a segunda classe.

Na liga de AlGaAs dois modos distintos de vibração, os 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. Na Figura 2.13 apresentamos os modos de vibração para o AlGaAs. Em $x = 0$ a energia efetiva está localizada entre os ramos LO e TO do GaAs. Por outro lado, em $x = 1$, a energia efetiva está localizada entre os ramos dos fônons LO e TO do AlAs, como pode ser observado na Figura 2.13(b). Kash *et al.* ^[2.20] demonstraram que a intensidade relativa das interações elétron-fônon-LO aumenta com a composição de alumínio.

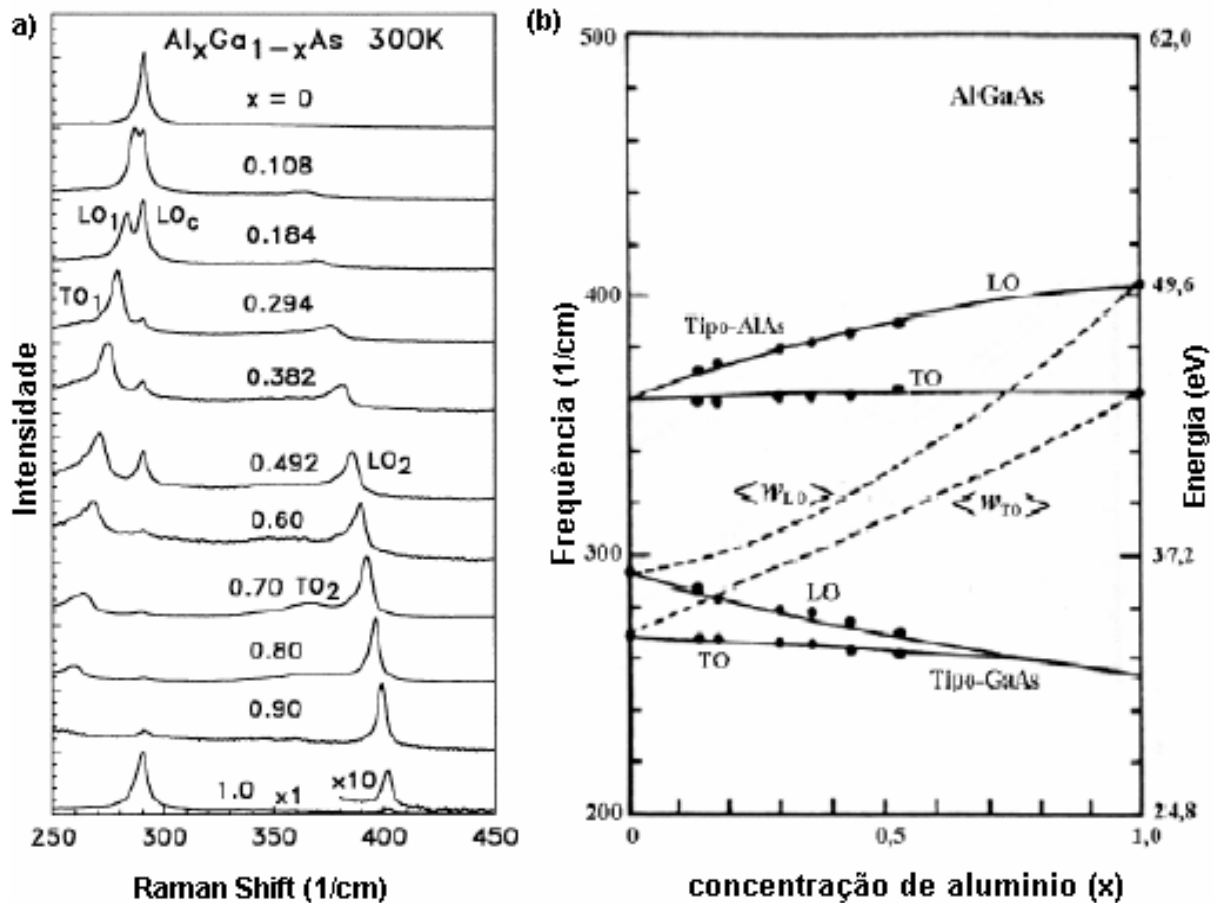


Figura 2.13. (a) Espectros Raman para diferentes concentrações de Alumínio na liga AlGaAs, mostrando os modos de fônons LO do tipo-GaAs (LO_1) e do tipo-AlAs (LO_2). Os modos TO do tipo-GaAs (TO_1) e do tipo-AlAs (TO_2) possuem menor intensidade em relação aos demais. O pico que aparece em 290 cm^{-1} ($35,9 \text{ meV}$), identificado por LO_c , representa os fônons LO da camada tampão de GaAs que compõe a amostra. (b) Energia dos fônons ópticos em função da composição de alumínio. $\langle \omega_{LO} \rangle$ e $\langle \omega_{TO} \rangle$ representam a dependência da energia efetiva dos fônons com a concentração de alumínio ^[2.19].

2.3. Orientação do substrato de GaAs

A superfície do substrato é de importância fundamental no processo de crescimento por MBE, devido à influência direta no ordenamento das espécies atômicas da camada que está sendo crescida. Em técnicas epitaxiais, como a de epitaxia por feixe molecular, o crescimento ocorre praticamente monocamada por monocamada sobre um substrato monocristalino. Como consequência, a estrutura crescida epitaxialmente deve exibir a mesma estrutura cristalina e mesma orientação do substrato.

As propriedades elétricas e ópticas do GaAs e das heteroestruturas de AlGaAs/GaAs e InGaAs/GaAs são fortemente influenciadas pela orientação do substrato ^[2.21 - 2.23]. A incorporação de dopantes em ligas de GaAs e AlGaAs e heteroestruturas formadas por estas ligas ^[2.24 - 2.33] depende da orientação do substrato, tanto para dopantes introduzidos intencionalmente (como silício), quanto incorporados não intencionalmente (como carbono). Esses efeitos resultam da influência da orientação do substrato na compensação elétrica dos dopantes introduzidos dentro da heteroestrutura ^[2.2].

As superfícies cristalinas são geralmente classificadas em três grupos: singular, vicinal e altos índices (utilizamos “altos índices” como uma tradução do termo inglês *high index*). O grupo singular corresponde aos planos com baixos índices de Muller os quais possuem alta simetria e coincidem com um mínimo local da energia de superfície. Na Figura 2.14(a) apresentamos a posição espacial dos diferentes planos cristalográficos através da projeção estereográfica de um cristal cúbico num triângulo unitário ^[2.34]. Existem três importantes planos singulares, a saber (100), (110) e (111), que estão localizados nas extremidades do triângulo unitário. Superfície vicinal é aquela que se encontra nas proximidades de uma superfície singular. Finalmente, superfícies de altos índices são aquelas que possuem um ou dois índices de Müller maiores que um. Na Figura 2.14(b) mostramos uma ilustração de uma superfície de altos índices (n11) localizada entre as superfícies (100) e (011) no espaço real ^[2.35]. As superfícies (n11) e (100) do cristal de GaAs *bulk* vistas ao longo da direção $[01\bar{1}]$ são mostradas na Figura 2.14(c) ^[2.35]. São mostrados ainda os ângulos formados entre a superfície (100) e (n11).

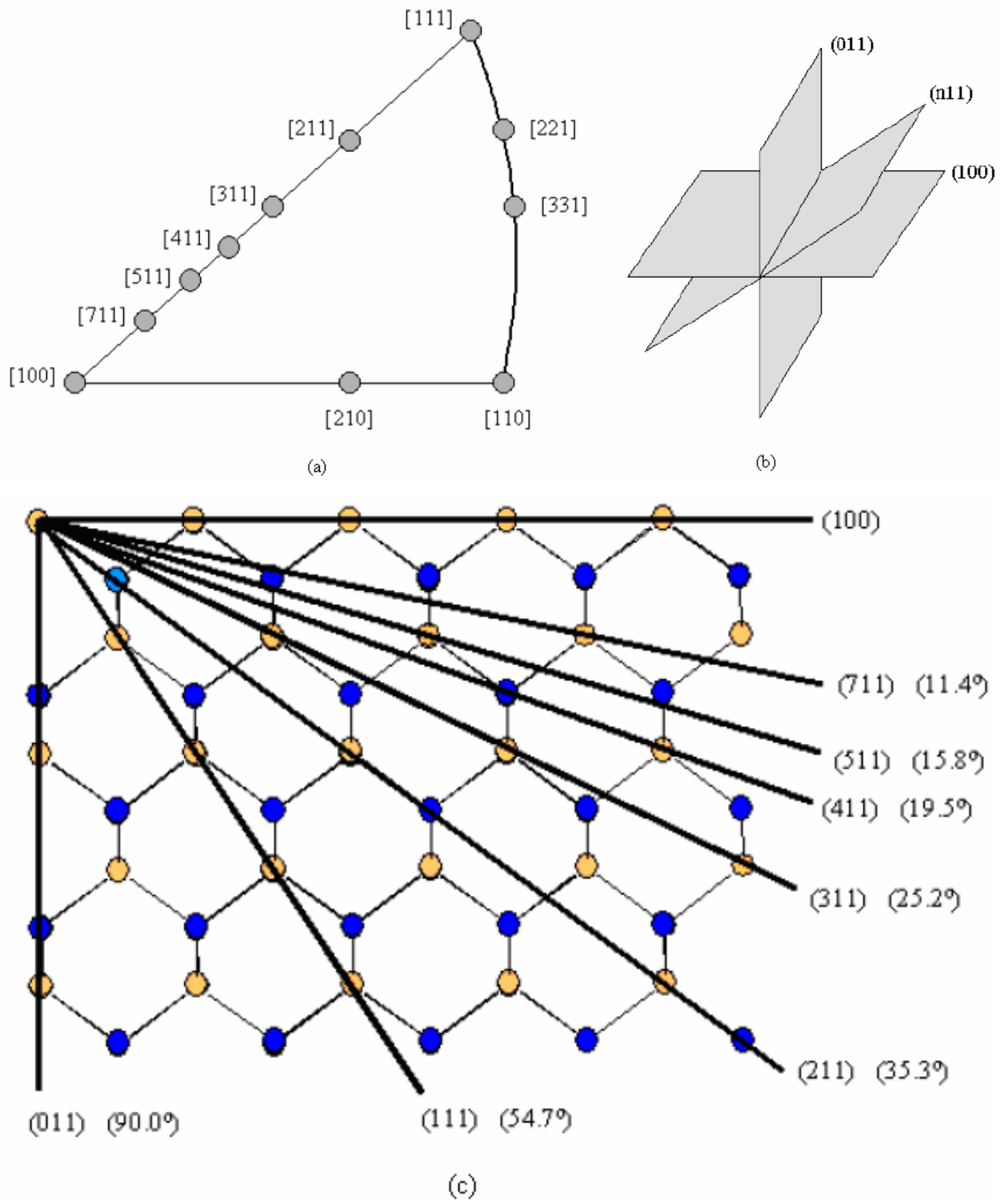


Figura 2.14. Representação esquemática (a) do triângulo unitário estereográfico ^[2,34], (b) das superfícies (n11) localizadas entre as superfícies (100) e (011) e (c) dos planos nas diferentes orientações. Esferas azuis representam átomos de arsênio e as laranjas átomos de gálio ^[2,35].

A influência da orientação do substrato nas propriedades elétricas e ópticas de heteroestruturas semicondutoras pode ser analisada pela geometria das ligações químicas na superfície do substrato. As geometrias das ligações superficiais para algumas orientações do substrato de GaAs são mostradas na Figura 2.15 ^[2,34]. A superfície (100) exibe apenas ligações pendentes duplas que correspondem à sua terminação em átomos de arsênio (Fig. 2.15(a)). A superfície (111) por sua vez, exibe apenas ligações pendentes simples (Fig. 2.15(b)). As superfícies entre a (100) e (111) são compostas de sítios de ligações simples e de sítios com ligações duplas, possuindo assim, comportamento intermediário às (100) e (111).

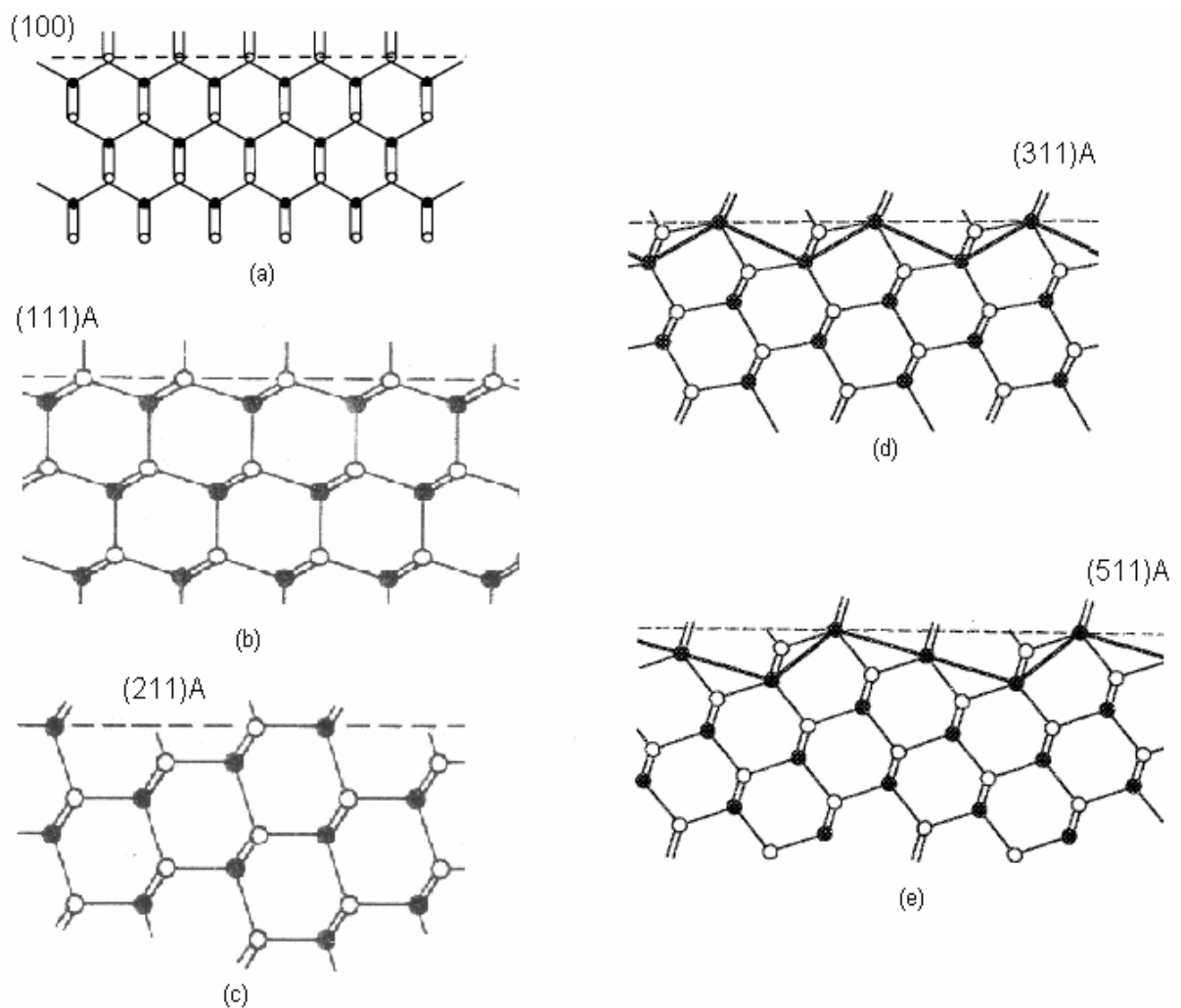


Figura 2.15. Representação esquemática da geometria das ligações superficiais do GaAs para diferentes orientações. A esfera branca representa o Ga e a preta o As ^[2,34].

No caso da superfície (211) (Fig. 2.15(c)) existem duas vezes mais sítios com ligações pendentes simples que em sítios com ligações duplas. Portanto, as propriedades superficiais (111)

predominam sobre as (100). A superfície (311) (Fig. 2.15(d)) consiste de números iguais de sítios com ligações pendentes simples e duplas relacionadas respectivamente com a terminação de átomos de Ga e As. Assim, as componentes (111) e (100) têm participações iguais. Para a orientação (511) e planos com índices maiores, as ligações duplas do tipo (100) superam as ligações simples do tipo (111), assim, as propriedades superficiais do tipo (100) predominam.

De acordo com a convenção introduzida por Gatos e Lavine^[2.36], o arranjo atômico impõe a polaridade A se o último plano atômico for formado por átomos do grupo III, ou B para planos atômicos terminados com átomos do grupo V, exceto para as direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$. A identificação cristalográfica das duas superfícies diferentes é uma questão de convenção. O lado A pode ser especificado como a superfície (111) e o lado B como a superfície $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, ou vice-versa. No entanto, a maioria dos trabalhos não adota essa convenção para o GaAs, ou mesmo para nenhum composto do grupo III-V. A maioria dos autores utilizam (111)A ou (111)B como um sistema de identificação da polaridade do substrato, embora esta seja uma utilização incorreta dos símbolos cristalográficos.

Uma questão central no crescimento de estruturas em escala nanométrica é como os átomos aderem e se difundem na matriz em que estão sendo depositados. A posição de um átomo é determinada pela rede cristalina. Na Figura 2.16 mostramos dois átomos sendo depositados em um determinado substrato^[2.35].

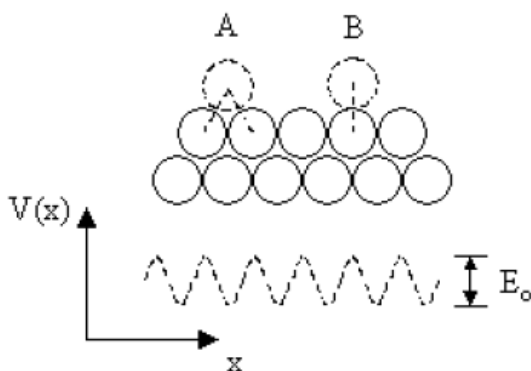


Figura 2.16. Representação esquemática de um potencial de uma rede cristalina. *A* e *B* indicam posições energeticamente estáveis e instáveis respectivamente, as quais correspondem a um mínimo e um máximo do potencial $V(x)$ da rede^[2.35].

O átomo na posição *A* está em um mínimo de energia e forma duas ligações com os átomos da superfície, correspondendo a um mínimo no potencial da rede $V(x)$. Para um átomo difundir em uma posição próxima na superfície, é preciso superar o potencial que existe entre os

dois átomos vizinhos que compõe o substrato. O excesso de energia E_0 necessário para a difusão, é a origem microscópica do potencial da rede. Um átomo em uma posição intermediária B , só poderá se ligar a um único átomo da matriz, formando uma posição desfavorável energeticamente, correspondendo assim, a um máximo no potencial $V(x)$.

Um fator de suma importância na difusão é a temperatura. A distância média que um átomo pode se difundir ao longo da superfície é determinada pela Lei de Arrhenius ^[2.37].

$$N = \omega_D \exp\left(-\frac{E_0}{k_B T}\right), \quad (2.5)$$

onde N é o número médio de saltos de um átomo entre uma posição e outra num intervalo unitário de tempo e ω_D corresponde à frequência de oscilação atômica. Tomando como exemplo um átomo de tungstênio (W) em uma superfície de tungstênio orientada na direção $[110]$ e considerando que este átomo viaja uma distância média L a 300 K em um determinado intervalo de tempo, ele irá percorrer uma distância 1000 vezes maior a 400 K no mesmo intervalo de tempo. A difusão atômica é, portanto, extremamente sensível à temperatura do substrato ^[2.37].

Outro ponto importante é a distância máxima que um átomo pode difundir, e se existe algum mecanismo físico que interrompa o processo de difusão na superfície. A difusão de um átomo numa superfície diminui se este átomo encontrar outro átomo, a extremidade de uma ilha ou um degrau. Na Figura 2.17 mostramos a situação onde um átomo adere à extremidade de uma ilha (região A) ^[2.35]. Este átomo forma uma ligação com um átomo na extremidade da ilha. A probabilidade de que o átomo escape desta extremidade a 600 K é 10^8 vezes menor do que a probabilidade característica de difusão de um átomo em uma superfície, ou seja, uma vez aderido na extremidade da ilha, o átomo permanecerá nesta posição por um longo período de tempo. O átomo ligado na região B (degrau) está ligado a dois outros átomos da ilha e levará um tempo muito maior para se mover ao longo da direção x . Assim, quando um átomo encontra uma extremidade de um degrau ou uma ilha, na maioria dos casos adere de forma quase irreversível. A probabilidade de escape possui uma dependência exponencial com a temperatura. A baixas temperaturas a adesão é quase irreversível, e com o aumento da temperatura a quebra das ligações químicas ocorre mais facilmente. Portanto, o crescimento de cristais a temperaturas relativamente altas facilita o posicionamento dos átomos em sítios adequados.

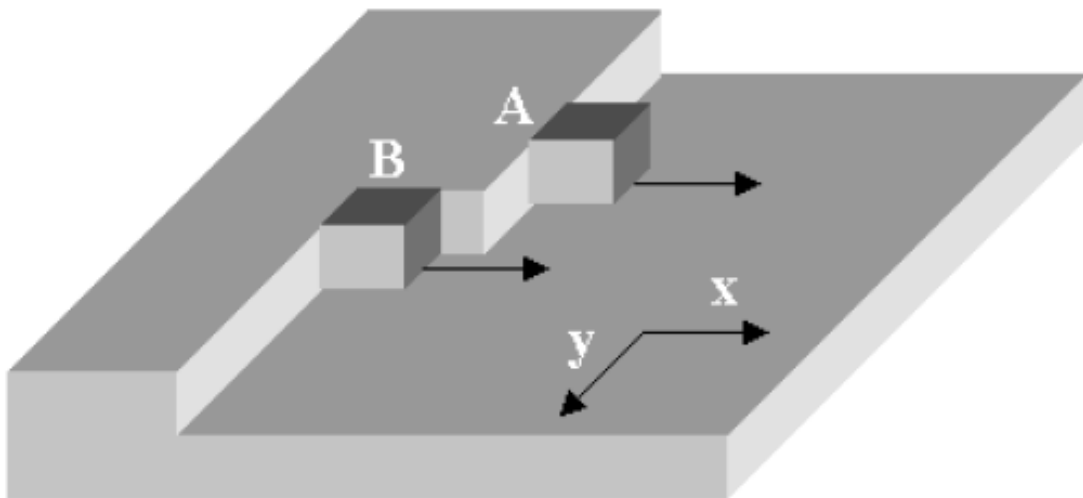


Figura 2.17. Adesão de átomos nas extremidades de uma ilha ou degraus ^[2.35].

Dependendo da estrutura atômica ou da orientação do substrato, a superfície pode se tornar altamente anisotrópica. Os átomos podem difundir facilmente em uma direção e ter uma alta resistência para a difusão em outras. Como exemplo, o átomo de W depositado no substrato de tungstênio orientado na direção $[110]$ citado anteriormente, precisa superar uma barreira de potencial de 0,90 eV para difundir nesta direção, e de 0,70 eV se a superfície for orientada na direção $[221]$. Na Figura 2.18 ilustramos um substrato de GaAs orientado na direção $[311]$, mostrando um degrau de 0,2 nm de altura com um terraço de 0,6 nm ^[2.35].

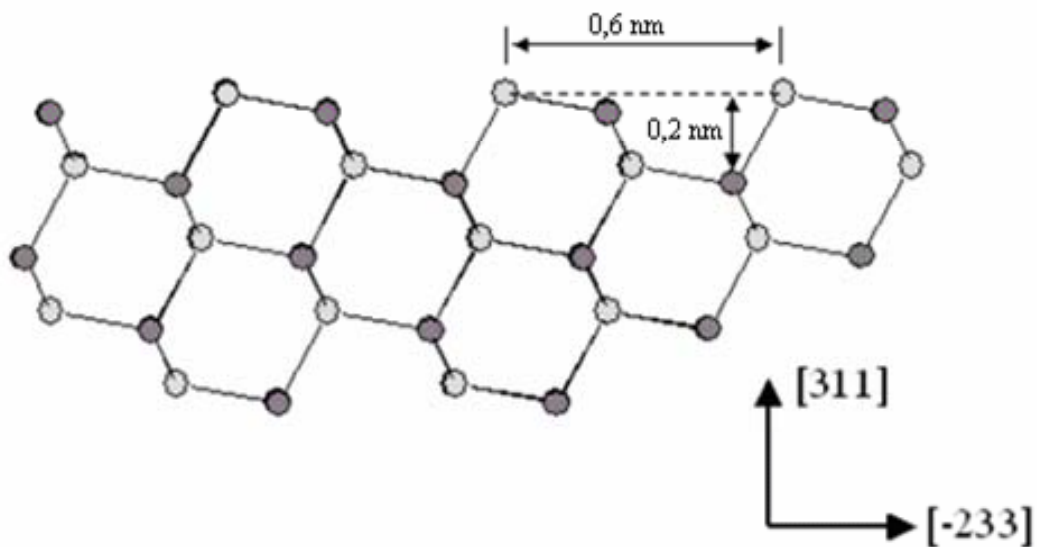


Figura 2.18. Vista lateral de um substrato de GaAs orientado na direção $[311]$, indicando a altura do degrau e a largura do terraço ^[2.35].

O crescimento por MBE na orientação $[100]$ ocorre principalmente por meio de nucleações em duas dimensões e propagação de degraus. É aceito que o mecanismo de crescimento borda-degrau-terraço descreve bem o crescimento do cristal. Para qualquer orientação entre (100) e (111) , a superfície vai exibir terraços (100) e rampas (111) (átomos na borda no degrau), como pode ser observado nas Fig. 2.18. A Figura 2.19(a) é uma representação esquemática dos degraus do tipo A e B em superfícies $(N11)A/B$. Os degraus do tipo A são vistos ao longo da direção $[011]$ e paralelos à direção $[01\bar{1}]$, e os do tipo B são vistos na direção $[01\bar{1}]$ paralelos à direção $[011]$. Na Figura 2.19(b) fica evidente que a densidade de degraus varia linearmente com o ângulo de corte do substrato em relação à superfície (100) (vide Fig 2.14(c)) [2.38 - 2.39].

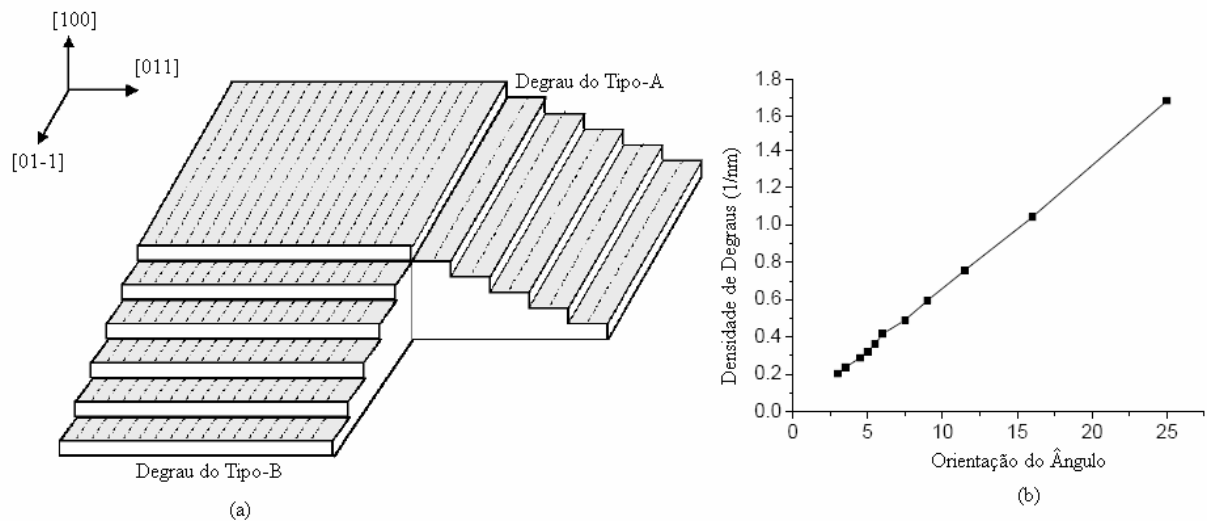


Figura 2.19. (a) Representação esquemática dos degraus do tipo A e B. Os resultados são para as superfícies $(N11)A/B$ [2.38]. (b) Densidade de degraus em função do ângulo de orientação das superfícies $(N11)$ em relação à superfície (100) [2.39].

2.4. Heteroestruturas de poços quânticos

O conceito de poço quântico foi desenvolvido inicialmente por Esaki e Tsu em 1970 [2.40]. Poços quânticos são exemplos de heteroestruturas que contêm camadas de diferentes materiais crescidos sobre uma base cristalina, sendo formados por um semiconductor intercalado entre outros dois semicondutores com *gap* de energia maior em relação ao primeiro. Na Figura 2.20(a) mostramos o perfil de potencial de um poço quântico com as bandas de valência e condução.

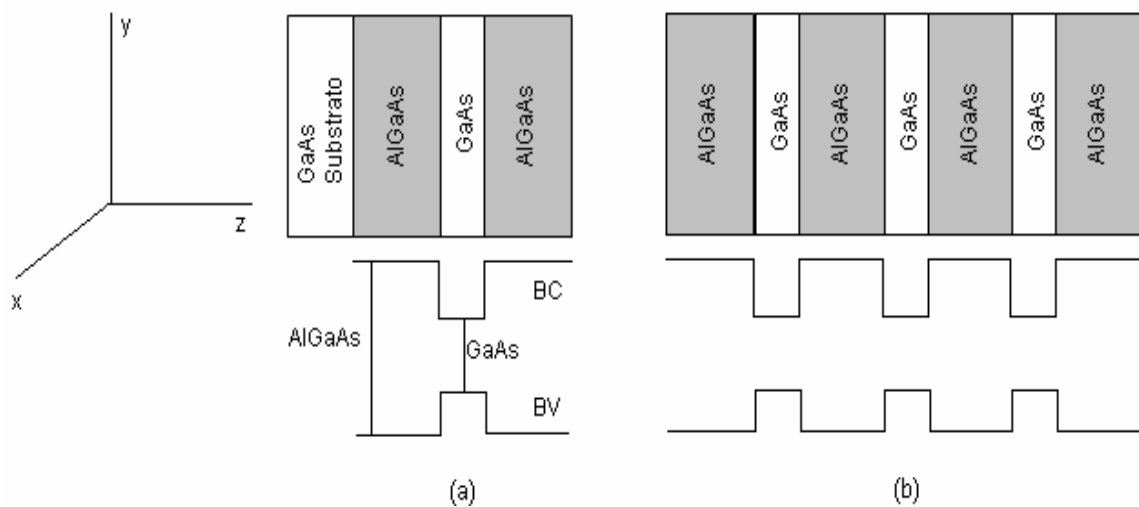


Figura 2.20. Perfil de potencial de (a) um poço quântico simples, com o GaAs sendo o material do poço e o AlGaAs o material que compõe as barreiras, (b) uma estrutura periódica, podendo ser uma super-rede ou poços quânticos múltiplos, dependendo da espessura da barreira. A direção z é escolhida como sendo a direção de crescimento.

Devido à superposição dos materiais com *gaps* de energias diferentes, existe a formação de uma região de confinamento (o poço quântico) de portadores de cargas com níveis de energia característicos e distintos dos materiais volumétricos individuais. Tomando como exemplo um poço formado pelas ligas AlGaAs/GaAs/AlGaAs, elétrons são aprisionados nas camadas de GaAs pelo potencial das barreiras do AlGaAs, devido às descontinuidades das bandas de condução de ambos. Da mesma forma, buracos são aprisionados pela descontinuidade nas bandas de valência. As barreiras quantizam os estados na direção de crescimento (z), mas o movimento dos portadores permanece livre nas outras duas direções. Por isso o poço quântico é conhecido como um sistema quase-bidimensional, no qual o movimento dos elétrons e buracos é quantizado em uma direção e livre nas outras duas.

Pode-se preparar estruturas periódicas de poços quânticos, chamadas de poços quânticos múltiplos MQWs (do inglês *MultiQuantum Wells*), como mostrado na Figura 2.20(b). Para isso, é necessário que a largura da barreira seja grande o suficiente para que os portadores contidos em um poço não interajam com portadores de outros poços, garantindo assim, que as propriedades do sistema sejam essencialmente as mesmas de um poço simples. MQWs são aplicados em situações que exigem alta densidade de emissão óptica. Por outro lado, se a barreira tem espessura pequena o suficiente para as funções de onda das partículas de um poço individual interagirem com as de outros poços, então se obtém a formação das chamadas super-redes SLs (do inglês *SuperLattices*), na qual fenômenos físicos distintos em relação aos poços são observados ^[2,41].

2.4.1. Níveis de energia

O confinamento dos portadores de carga na direção de crescimento leva à formação de níveis de energia discretos para elétrons e buracos. A função de onda e os estados quantizados das energias dos portadores nas bandas de condução e valência podem ser calculados através da equação de Schrödinger. Para resolver esta equação, inicialmente separa-se a parte que descreve o movimento dos portadores no plano x-y (movimento livre) da parte onde o movimento é quantizado. Essa proposta elimina a dificuldade de resolver a eq. de Schrödinger em três dimensões. A função de onda que descreve buracos e elétrons em suas respectivas bandas pode ser escrita como:

$$\Psi(x, y, z) = \psi(x, y)\varphi(z), \quad (2.6)$$

onde o primeiro termo do lado direito ($\psi(x, y)$) descreve o movimento livre e o segundo termo o movimento quantizado ($\varphi(z)$). Os estados do sistema são descritos por dois parâmetros: um vetor de onda \vec{k} para especificar o movimento livre no plano x-y, e um número quântico “n” para indicar os níveis de energia na direção z. A energia total do sistema é obtida pela soma das energias dos níveis quantizados, e do movimento no plano x-y:

$$E^{\text{total}}(n, \vec{k}) = E_n + E(\vec{k}), \quad (2.7)$$

onde E_n é a energia quantizada do n-ésimo nível de energia, e $E(\vec{k})$ é a energia associada ao movimento livre dos portadores no plano x-y. Neste plano, as funções de onda dos elétrons e buracos podem ser escritas em termos de ondas planas da forma:

$$\psi_{\vec{k}}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{A}} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (2.8)$$

onde A é uma constante de normalização. A energia correspondente a este movimento é justamente a energia cinética:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}, \quad (2.9)$$

em que m^* é a massa efetiva dos portadores. Assim, a energia total para elétrons e buracos nos n -ésimos níveis de energia é:

$$E^{\text{total}}(n, \vec{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}, \quad (2.10)$$

onde E_n depende do perfil de potencial e várias aproximações para a estrutura do potencial real podem ser encontradas na literatura.

2.4.2. Poço de potencial infinito

Na Figura 2.21 mostramos o perfil de potencial de um poço quântico com largura L_w e barreiras infinitas ^[2.41].

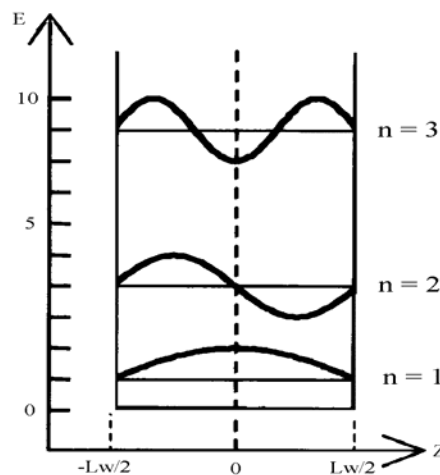


Figura 2.21. Perfil de um poço de potencial com largura L_w e barreiras de alturas infinitas ^[2.41].

Considerando o centro do poço quântico como o centro de coordenadas, o potencial pode ser descrito por:

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \text{para } -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ \infty & \text{para } z \leq -\frac{L_w}{2} \text{ ou } z \geq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (2.11)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo, unidimensional, para a região do poço, onde $U(z) = 0$, é escrita na forma:

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

Como a barreira é infinita, a probabilidade de uma partícula tunelar do poço para a barreira é zero, assim, a eq. 2.12 está sujeita a condição de contorno em que $\varphi = 0$ nas interfaces. A solução é da forma:

$$\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L_w}} \text{sen}\left(k_n z + \frac{n\pi}{2}\right), \quad (2.13)$$

onde n é o número quântico principal, e $k_n = \frac{n\pi}{L_w}$ (2.14)

Esta forma da função de onda descreve uma onda dentro de um poço com nós nas interfaces, como ilustrado na Figura 2.21. A energia que corresponde ao n -ésimo nível de energia é dada por ^[2.41, 2.42]:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_w}\right)^2 \quad (2.15)$$

A energia total é dada por:

$$E^{\text{total}}(n, \vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_w}\right)^2 + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}, \quad (2.16)$$

onde $E^{\text{total}}(n, \vec{k})$ é a soma dos autovalores de energia na direção z com a energia correspondente ao movimento nas direções x e y . As funções de onda dos três primeiros níveis são mostradas na Figura 2.21. O estado em $n = 1$ é chamado de estado fundamental e os demais, estados excitados.

Os níveis de energias são inversamente proporcionais à massa efetiva e ao quadrado da largura do poço, de acordo com a eq. 2.16.

2.4.3. Poço de potencial finito

Na Figura 2.22 mostramos o diagrama da banda de condução de um poço quântico com potencial finito, com barreira V_0 ^[2.41].

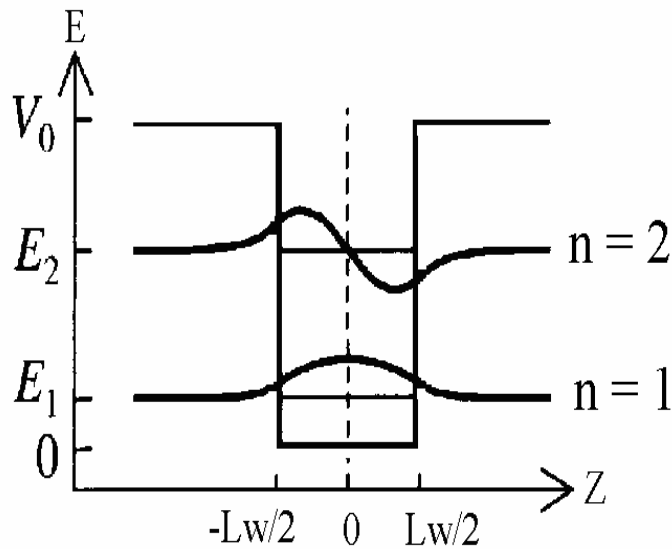


Figura 2.22. Perfil de um poço de potencial com largura L_w e barreiras de altura V_0 . São mostrados o primeiro e segundo níveis de energia ^[2.41].

Neste caso, as partículas do poço têm uma probabilidade diferente de zero de serem encontradas na região da barreira. Considerando novamente o centro do poço como o centro de coordenadas, o potencial pode ser descrito por:

$$U(z) = \begin{cases} E & \text{para } -\frac{Lw}{2} < z < \frac{Lw}{2} \\ 0 & \text{para } z \leq -\frac{Lw}{2} \text{ ou } z \geq \frac{Lw}{2} \end{cases} \quad (2.17)$$

A equação de Schrödinger dentro do poço é a mesma para o poço infinito (eq. 2.12), cuja solução é dada nas formas:

$$\varphi_w(z) = C \sin(k_w z) \quad (2.18)$$

e

$$\varphi_w(z) = C \cos(k_w z) \quad (2.19)$$

O sub-índice “w” indica que o vetor de onda k e a massa efetiva referem-se à região do poço. A equação de Schrödinger na região da barreira é escrita na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + V_0 \varphi(z) = E \varphi(z), \quad (2.20)$$

onde m_b^* é a massa efetiva na barreira. As soluções da eq. 2.20 decaem exponencialmente dentro da barreira, de acordo com:

$$\varphi_b = C' \exp(\pm k_b z), \quad (2.21)$$

onde k_b satisfaz a equação:

$$\frac{\hbar^2 k_b^2}{2m_b^*} = V_0 - E, \quad (2.22)$$

Assim, para estados ligados, as soluções na região da barreira são dadas por:

$$\begin{cases} \varphi(z) = C' \exp(-k_b z) & \text{para } z \geq +d/2 \\ \varphi(z) = C' \exp(+k_b z) & \text{para } z \leq -d/2 \end{cases} \quad (2.23)$$

As funções de onda e a energia dos estados ligados podem ser encontradas pela aplicação apropriada das condições de contorno nas interfaces. Neste caso, fazemos uso da condição da continuidade para a função de onda $\varphi(z)$ e para $(1/m^*)d\varphi/dz$ nas interfaces em $\pm L_w/2$ (necessária para a conservação da corrente de partícula)^[2.41]. Assim, tem-se:

$$\varphi_w(\pm d/2) = \varphi_b(\pm d/2) \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \left(\frac{d\varphi_w}{dz} \right)_{z=\pm d/2} = \frac{1}{m_b^*} \left(\frac{d\varphi_b}{dz} \right)_{z=\pm d/2} \quad (2.25)$$

Considerando as soluções na forma de cossenos no poço quântico, a continuidade da função de onda requer que:

$$C \cos\left(\frac{k_w d}{2}\right) = C' \exp\left(-\frac{k_b d}{2}\right) \quad (2.26)$$

A continuidade do fluxo implica em:

$$-C \frac{k_w}{m_w^*} \operatorname{sen}\left(\frac{k_w d}{2}\right) = -C' \frac{k_b}{m_b^*} \exp\left(-\frac{k_b d}{2}\right), \quad (2.27)$$

Dividindo a eq. 2.27 pela eq. 2.26, obtemos:

$$\tan\left(\frac{k_w d}{2}\right) = \frac{m_w^* k_b}{m_b^* k_w}, \quad (2.28)$$

Procedendo de maneira análoga para soluções na forma de senos, encontramos:

$$\tan\left(\frac{k_w d}{2}\right) = -\frac{m_b^* k_w}{m_w^* k_b}, \quad (2.29)$$

As equações 2.28 e 2.29 são equações transcendentais e não podem ser resolvidas analiticamente. O procedimento descrito anteriormente também pode ser aplicado aos buracos leves e pesados na banda de valência ^[2.41]. Na Figura 2.23 mostramos a solução gráfica das equações 2.28 e 2.29 para um poço de Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs. Utilizando os parâmetros para este caso, foi encontrada uma energia do primeiro estado ligado eletrônico de 31,5 meV ^[2.41].

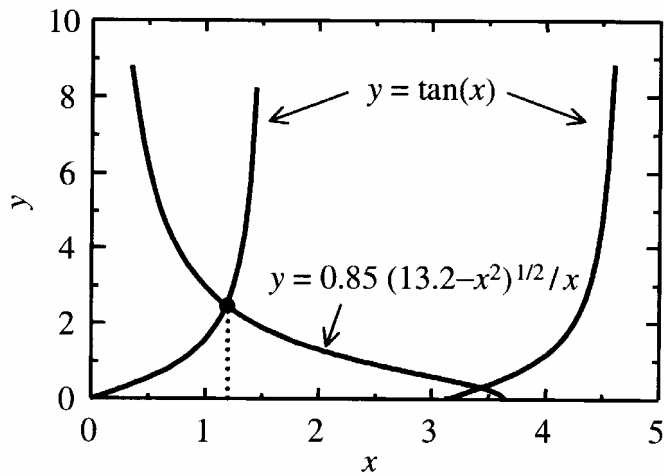


Figura 2.23. Soluções gráficas das eq. 2.28 e 2.29 para um poço quântico de AlGaAs/GaAs. O ponto $x = 1,2$ é o ponto de intersecção das duas funções e determina o valor da energia do primeiro estado ligado ^[2.41].

A partir das equações 2.28 e 2.29 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 ^[2.41]. Apesar de bastante simples, as soluções obtidas para as autoenergias e autofunções do poço quântico finito permitem uma análise qualitativa de heteroestruturas de poços quânticos reais.

É ainda interessante notar que com a penetração da função de onda das partículas na barreira, ocorre uma diminuição da energia de confinamento quando comparado ao poço de barreira infinita.

2.4.4. Fônons em poços quânticos

Como acontece nas ligas de AlGaAs, em poços quânticos de GaAs/AlGaAs também existem fônons do tipo-GaAs e do tipo-AlAs. Na Figura 2.24(a) mostramos os resultados obtidos por espectroscopia Raman, de poços quânticos múltiplos de GaAs/AlGaAs com diferentes concentrações de alumínio ^[2.43]. No GaAs, os fônons LO possuem energia de 36,7 meV no ponto de simetria Γ . No 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 2.24(b) representam a variação da energia efetiva dos fônons ópticos em função da concentração de Al. Assim como

para a liga volumétrica AlGaAs, a energia efetiva dos fônons LO aumenta com a concentração de Al em poços quânticos de GaAs/AlGaAs.

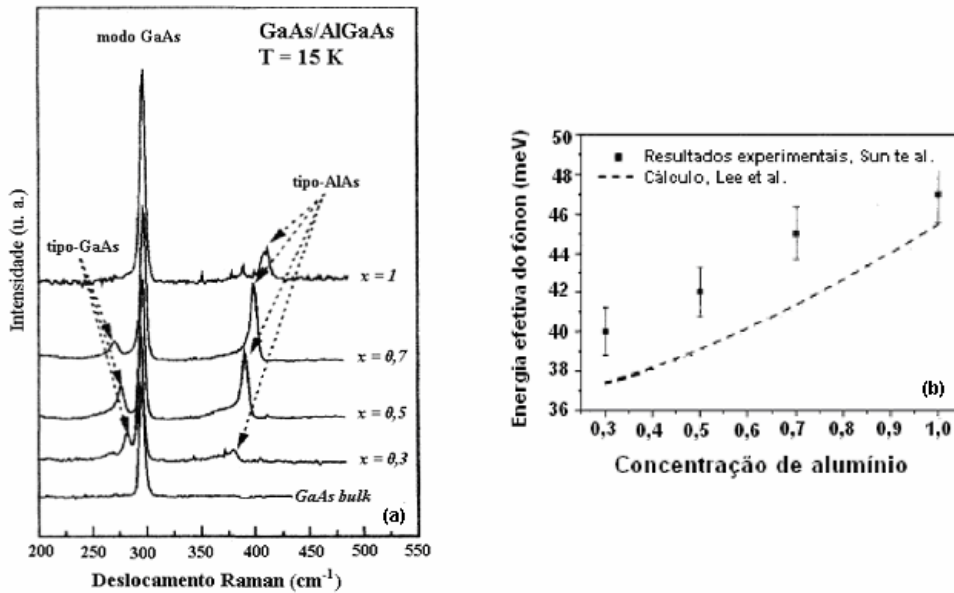


Figura 2.24. (a) Espectros Raman para poços quânticos múltiplos de GaAs/AlGaAs com diferentes concentrações de Al^[2.43]. (b) Variação da energia efetiva dos fônons ópticos com a composição de Al da barreira. A linha tracejada representa os cálculos realizados por Lee *et al.*^[2.44].

Para se entender o comportamento de fônons em heteroestruturas semicondutoras, é necessário conhecer a relação de dispersão de cada um dos materiais individualmente. Os fônons ópticos no GaAs e AlAs possuem frequências distintas no limite da zona de Brillouin. Assim, em poços quânticos formados por estas ligas, existem modos que se propagam somente no AlAs (GaAs) e não no GaAs (AlAs), fazendo surgir efeitos de confinamento.

No caso de fônons acústicos, os ramos mostram características muito similares: se anulam em $k \rightarrow 0$ e sua relação de dispersão é linear com k para $k \sim 0$ em qualquer material na região do vale Γ . A presença do Al não altera significativamente o comportamento de $\omega(\vec{k})$, no AlAs em relação ao GaAs. Essa característica geralmente evita o confinamento dos fônons acústicos e estes se propagam em ambos os materiais. Portanto, fônons acústicos podem ser representados como fônons misturados com uma relação de dispersão mediada pelos dois materiais volumétricos constituintes da heteroestrutura e os fônons ópticos originam os fônons confinados (*confined*).

A existência de interfaces entre os diferentes materiais que compõem os poços e barreiras, gera fônons de interface que decaem exponencialmente na região próxima dos dois materiais.

Existem dois modelos que descrevem o comportamento experimental deste tipo de fônon. O modelo do dielétrico comum “DMC” (fornece os modos confinados e os de interface), em que cada camada da heteroestrutura é substituída por um meio dielétrico, cuja constante dielétrica é caracterizada em termos da frequência de oscilação do meio ^[2.45], e o modelo de Huang-Zhu ^[2.46].

A principal questão no estudo de fônons em poços quânticos é definir quais são os tipos de fônons presentes, de interface ou confinados. Algumas técnicas, como a fotoluminescência, não permitem a determinação direta dos tipos de fônons que estão mais ou menos ativos nos processos físicos de espalhamentos em poços quânticos. Lee *et al.* ^[2.44] obtiveram 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 significativo para larguras inferiores a 50 Å. Para espessuras superiores a esta a contribuição predominante é dos fônons confinados. Neste mesmo trabalho, os autores analisaram o espalhamento proporcionado pelos diversos tipos de fônons. Destes resultados, concluíram que o espalhamento proporcionado por fônons de interface, é aproximadamente três vezes superior ao proporcionado pelos fônons confinados.

2.5. Propriedades dos poços quânticos de Al_xGa_{1-x}As/GaAs crescidos em diferentes orientações cristalográficas.

2.5.1. Offset

Os *gaps* de energia dos materiais que compõem o poço e a barreira são diferentes entre si. Considerando E_g^{AlGaAs} , o *gap* do material ternário que constitui a barreira, e E_g^{GaAs} , o *gap* do material binário que forma o poço, a diferença de energia entre os *gaps* dos dois semicondutores é dada por:

$$\Delta E_g = E_g^{\text{AlGaAs}} - E_g^{\text{GaAs}} \quad (2.30)$$

Na Figura 2.25, observa-se que esta diferença de energia não está distribuída de forma equitativa entre a BC e a BV. Os valores dos *offsets* da banda de condução (ΔE_c) e da banda de valência (ΔE_v), para o poço de Al_xGa_{1-x}As/GaAs são dados por ^[2.47]:

$$\Delta E_c = 0.65 \Delta E_g, \quad (2.31)$$

$$\Delta E_v = 0.35 \Delta E_g, \quad (2.32)$$

O valor de ΔE_c pode variar de 0,60 a 0,70, dependendo da referência utilizada, embora esta variação seja pouco sensível no cálculo dos níveis de energia e ligação excitônica de um poço quântico.

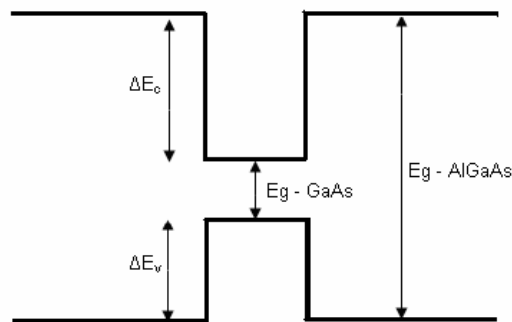


Figura 2.25. *Offsets* da banda de condução e banda de valência.

Zhang *et al.* [2.48], Duggan *et al.* [2.49], Rogers and Nicholas [2.50], Arnold *et al.* [2.51], e Wang *et al.* [2.52], demonstraram que a razão dos *offsets* entre a banda de condução e a banda de valência para poços de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crescidos sobre diferentes orientações, é a mesma daquela para os poços crescidos na direção [100]. O *offset* estimado por estes autores é de $\text{BC} / \text{BV} = 65/35$ qualquer que seja a orientação do substrato escolhido.

2.5.2. Massa efetiva

Determinar a massa efetiva dos buracos pesados e leves em poços quânticos crescidos em diferentes orientações tem sido um problema de interesse tanto experimental quanto teórico nas duas últimas décadas. Ainda não há consenso para os valores das massas efetivas desses portadores de carga quando o substrato possui orientação diferente da [100], embora vários trabalhos apresentem valores coerentes entre si. Para poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crescidos na direção [100], os valores das massas efetivas dos elétrons, buraco pesado e buraco leve adotados são $(0,067 + 0,083x)m_0$, $(0,34 + 0,014x)m_0$ e $(0,087 + 0,078x)m_0$ respectivamente, onde m_0 é a massa do elétron ($9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$) [2.53].

Ligas e heteroestruturas crescidas em diferentes orientações apresentam a formação de campos piezolétricos devido aos efeitos de tensão, e têm suas estruturas de bandas e parâmetros de Luttinger alterados, o que dificulta a estimativa da massa efetiva dos portadores. Vários resultados de trabalhos na literatura mostram valores das massas efetivas de buracos pesados e / ou leves em poços quânticos de GaAs/AlGaAs em diferentes orientações do substrato de GaAs, como relatados a seguir:

✓ Xia ^[2.54] demonstrou que em orientações [N11], onde N é um inteiro, as propriedades relacionadas às estruturas de sub-bandas de buracos pesados são sensíveis à orientação devido à grande anisotropia da banda de valência. Na Figura 2.26 mostramos os resultados obtidos neste trabalho para a massa efetiva em função da orientação do substrato. Existe uma grande variação da massa efetiva do buraco pesado com a orientação do substrato, sendo o valor para a direção [311] de 0,54 m_0 . Por outro lado, buracos leves são praticamente insensíveis à variação de orientação.

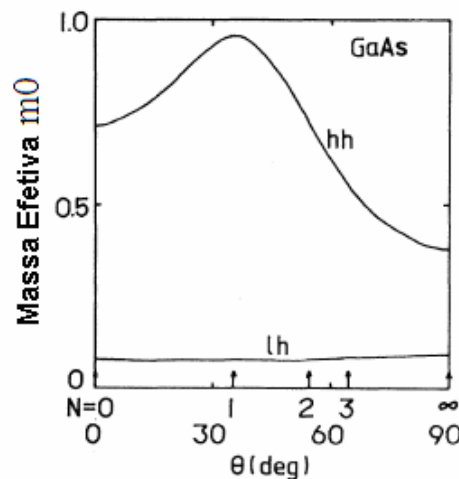


Figura 2.26. Massa efetiva de buraco pesado e buraco leve para substratos com orientações [N11], onde Θ é o ângulo entre os três eixos e o plano x-y ^[2.54].

✓ J. Los *et al.* ^[2.55], utilizando o modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 8 x 8, obtiveram os valores para a massa efetiva de buracos pesados em diversas orientações, que podem ser vistos na Tabela 2.1.

Tabela 2.1. Valores das massas efetivas de buracos pesados nas orientações [N11] e [100].

(hkl)	(111)	(211)	(311)	(411)	(511)	(100)
m_{hh}^*	0,952	0,690	0,527	0,453	0,432	0,377

✓ Khalifi *et al.* [2.56] determinaram os valores das massas efetivas de buracos pesados e leves na orientação [311]A, através de medidas de refletividade e fotoluminescência. Os valores encontrados foram de $m_{hh}^* = 0,55m_0$ e $m_{lh}^* = 0,085m_0$ respectivamente. Nota-se que o valor para a massa do buraco leve é muito próximo ao da direção [100].

✓ Harima *et al.* [2.57] através de medidas de fotoluminescência estimaram as massas efetivas de buracos pesados como sendo $0,95m_0$, $0,54m_0$, $0,34m_0$ para as direções [111]A, [311]A e [100] respectivamente.

✓ Soohaeng *et al.* [2.58] estudaram materiais preparados na orientação [111]A e, empregando as técnicas de fotoluminescência e fotorefletância, determinaram as massas efetivas de buraco pesado e leve como: $m_{hh}^* = (0,95 \pm 0,02)m_0$ e $m_{lh}^* = 0,08m_0$ respectivamente.

✓ Cole *et al.* [2.59] utilizando a técnica de magnetofotoluminescência e cálculos teóricos determinaram uma massa efetiva para buraco pesado de $0,388m_0$ na direção [311]B.

Em todos os trabalhos citados [2.54 - 2.59] o valor encontrado para a massa efetiva do elétron para qualquer orientação é o mesmo da direção [100]. De acordo com nosso conhecimento, a determinação exata da massa efetiva em poços quânticos crescidos em diferentes orientações é um problema que permanece em aberto. Há carência de uma expressão que relacione a massa efetiva do poço e da barreira com a concentração de alumínio, e ainda existem diferenças entre os trabalhos publicados na literatura.

2.5.3. Sub-banda de energia

Quando a superfície do substrato é alterada em relação à (100), a estrutura da sub-banda de valência de poços quânticos varia significativamente. Na Figura 2.27 mostramos as estruturas das sub-bandas de valência de poços de GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As, calculadas por Houngh *et al.* [2.60] utilizando o modelo do orbital ligado. Observa-se que para a superfície (111) o segundo nível de buraco pesado está abaixo do primeiro nível de buraco leve, ao contrário da (100), e todos os níveis são sensíveis à orientação do substrato. Estas mudanças na estrutura de bandas implicam em diferentes propriedades ópticas e elétricas das heteroestruturas em relação às orientadas na superfície convencional (100).

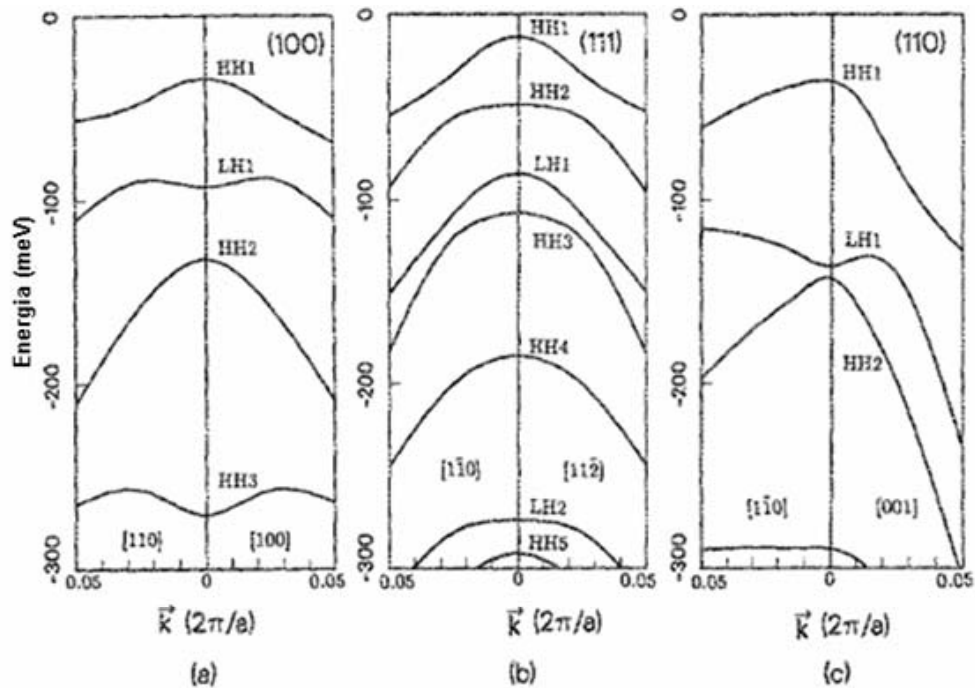


Figura 2.27. Estrutura das sub-bandas de valência de poços quânticos de GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As com largura de 70 Å crescidos nos planos (a) (100), (b) (111) e (c) (110) ^[2.60].

2.6. Flutuação de potencial

O perfil local do potencial de confinamento de um poço quântico simples é dominado por flutuações na largura do poço e na composição química das ligas que compõem o poço de potencial e/ou a barreira de confinamento. Para baixas temperaturas e baixas intensidades de excitação, essas desordens possuem um forte efeito sobre o movimento dos portadores e nas recombinações radiativas, que geralmente são dominadas por éxcitons localizados.

De acordo com a magnitude das flutuações do potencial e com a intensidade 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 intensidade 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. Em sistemas com altas intensidades de flutuação do potencial, a variação de energia do pico de PL com a temperatura apresenta a forma conhecida como tipo *S invertida*. A posição do pico de PL diminui, aumenta e volta a diminuir (*red/blue/redshift*) com o aumento da temperatura.

A Figura 2.28(a) mostra a densidade de estados em poços quânticos. As linhas vermelhas correspondem à densidade de estados em sistemas onde as flutuações de potencial não são relevantes. Os efeitos das flutuações de potencial (observados em baixas temperaturas e em baixas intensidades de excitação) predominam nos espectros de PL, provocando um prolongamento (*band-tail*) na densidade de estados excitônica (DOS) abaixo da distribuição dos estados fundamentais da heteroestrutura, que é representado pelas linhas verdes. As recombinações radiativas dos estados do *band-tail* são deslocadas para menores energias em relação às energias de recombinação dos éxcitons deslocalizados ^[2.61].

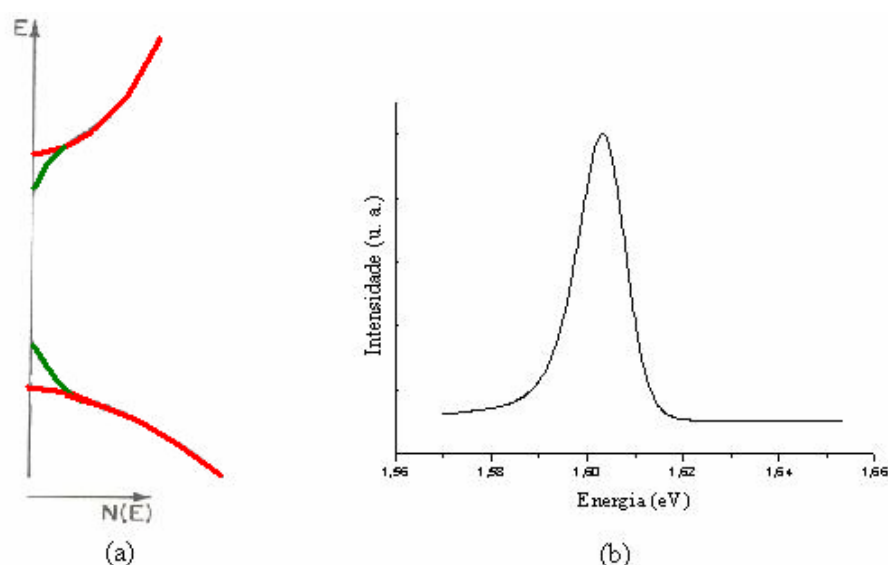


Figura 2.28. (a) Distribuição da densidade de estados o qual representa o número de estados para cada intervalo de energia. As linhas vermelhas mostram a distribuição de estados no caso sem flutuação. (b) Espectro de PL a 12 K de um poço de GaAs/AlGaAs, mostrando a cauda exponencial no lado de menor energia ^[2.61].

Na Figura 2.28(b) apresentamos um espectro de PL, relacionado à transição excitônica elétron-buraco pesado em um poço quântico de GaAs/AlGaAs. Para baixas intensidades de excitação e baixas temperaturas, existe uma assimetria no lado de menor energia, com uma calda aparentemente exponencial. Esta forma de linha tem sido usada como uma assinatura das recombinações de éxcitons localizados nas desordens microscópicas presentes no material semiconductor. Um espectro de fotoluminescência de amostras com flutuações corresponde a uma superposição de linhas de emissão relativas às diferentes energias de *gap* associadas a estas flutuações, o que torna o espectro de emissão alargado ^[2.62 - 2.64]. O espectro começa a ficar mais estreito à medida que a temperatura aumenta e a forma de linha torna-se característica de éxcitons livres FE (do inglês *Free Exciton*).

Na Figura 2.29 mostramos as flutuações de potencial com forma do tipo *S* invertido para diversas ligas semicondutoras [2.65]. Este tipo de flutuação ocorre em sistemas semicondutores onde as flutuações de potencial são mais intensas. Inicialmente o pico de PL sofre um *redshift* seguido por um *blueshift* e finalmente o *redshift* esperado na maioria dos materiais semicondutores.

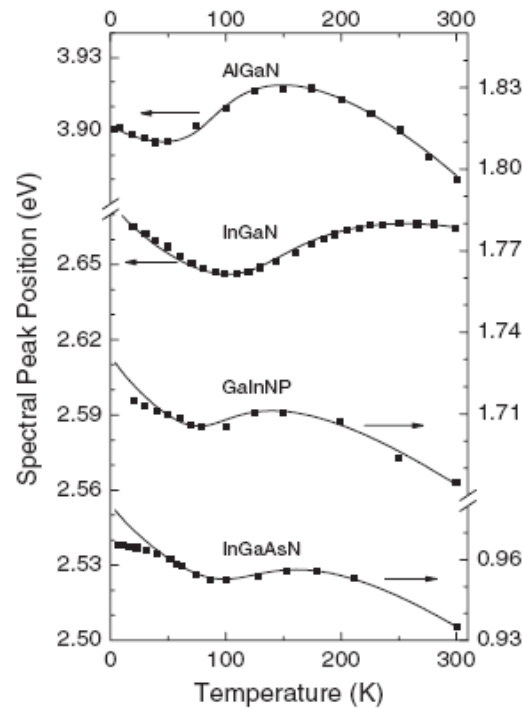


Figura 2.29. Forma *S* invertida do pico de luminescência em função da temperatura para vários materiais semicondutores [2.65].

Após ocorrer a fotoexcitação dos portadores, estes tendem a relaxar via emissão de fônons para estados de mais baixa energia gerados pelas flutuações de potencial. Quando a temperatura da rede é baixa, o portador pode ficar preso em uma região que apresenta maior densidade de estados ou menor flutuação do potencial, e conseqüentemente a probabilidade de ocupação do elétron e / ou buraco é maior. O diagrama da flutuação de potencial pode ser visto na Figura 2.30.

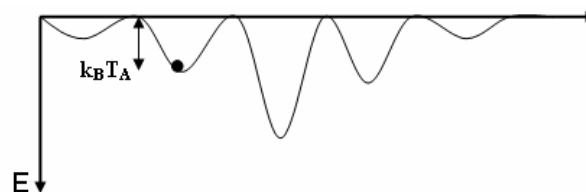


Figura 2.30. Diagrama de flutuação do potencial para baixas temperaturas. Em baixas temperaturas e baixas intensidades de excitação os portadores irão relaxar para o mínimo de um potencial local.

Com o aumento da temperatura, é possível que a energia adquirida ($k_B T_B$) seja suficiente para que o portador escape do potencial local e possa ser aprisionado em um mínimo mais profundo que o anterior, como mostrado na Figura 2.31.

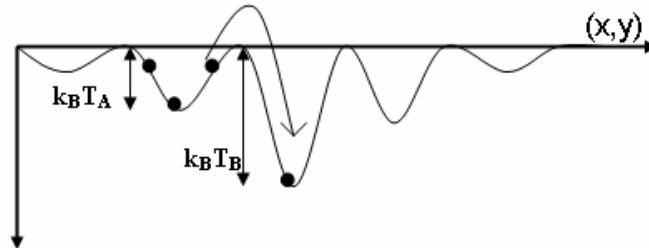


Figura 2.31. Difusão do portador para mínimos de potenciais mais profundos.

Desde que recombinação óptica ocorra a partir de vales mais profundos do potencial, o pico de PL se desloca para regiões de menores energias, ocorrendo inicialmente um *redshift* do pico. Quando todos os portadores de carga ocupam os potenciais mais profundos, o pico de PL atingirá um valor de menor energia a uma dada temperatura T_B . Quando a temperatura aumenta a partir de T_B , os portadores ganham energia para superar as flutuações mais profundas (Fig 2.32), e passam a recombinar a partir de quaisquer estados de maiores energias, provocando um *blueshift* do pico de PL até atingir uma segunda temperatura característica T_C . Com o aumento da temperatura os elétrons podem blindar as flutuações de potencial.

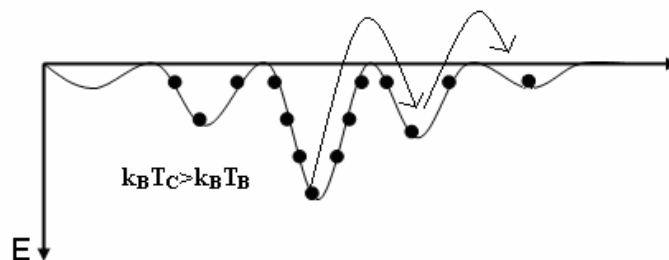


Figura 2.32. Diagrama representativo da blindagem das flutuações de potencial.

Para valores de temperatura maiores do que T_C , o pico de PL sofre um novo *redshift* acompanhando o comportamento padrão do *gap* de materiais semicondutores com a temperatura [2.63, 2.66].

Existem sistemas como poços quânticos de GaAs/AlGaAs onde as flutuações de potencial são baixas, ou seja, as flutuações intermediárias ocorrem em um número muito maior em relação as flutuações mais profundas. Neste caso, no regime de baixas temperaturas e baixas intensidades

de excitação, os portadores fotoexcitados são termalizados para os mínimos da DOS. Com o aumento da temperatura, os portadores são excitados termicamente para maiores energias provocando um *blueshift* na posição do pico de luminescência até determinada temperatura, a partir da qual ocorre o *redshift* causado pela redução do gap de energia devido à interação elétron-fônon e expansão térmica da rede. Este comportamento é conhecido como *blue/redshift behavior*. Na Figura 2.33 mostramos o comportamento do pico de fotoluminescência correspondente a transição excitônica em função da temperatura de uma super-rede de InGaAs/InGaAlAs dopada com silício [2.67]. Na região de baixas temperaturas, para a potência de excitação de 0,1 mW, há um *blueshift* do pico de PL até um determinado valor máximo de energia, a partir do qual ocorre o *redshift* observado em materiais semicondutores. As flutuações de potencial são blindadas para a potência de 10 mW.

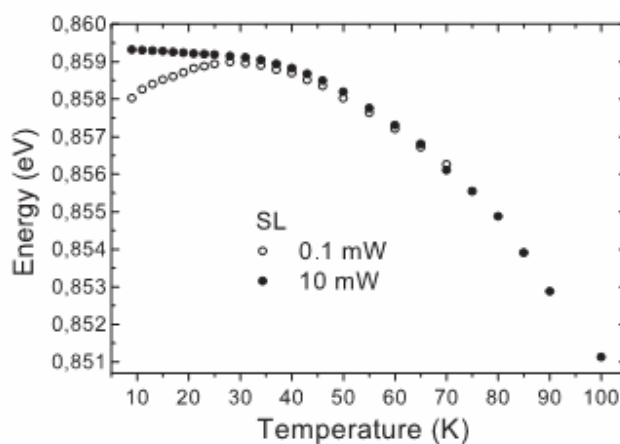


Figura 2.33. Pontos experimentais da transição excitônica em função da temperatura obtidos por fotoluminescência de super-redes de InGaAs/InGaAlAs com duas diferentes potências de excitação. Na região de baixas temperaturas fica evidenciado o comportamento do tipo *blueshift* para a menor intensidade de excitação [2.67].

Os efeitos das flutuações de potencial nas recombinações excitônicas em poços quânticos são investigados em termos das flutuações nas larguras dos poços e da composição química da barreira. Estudos indicam que para poços com diferentes espessuras, mas com mesmas rugosidades nas interfaces, a interação dos éxcitons com as desordens das interfaces diminui à medida que a largura do poço aumenta [2.68 - 2.78].

Em trabalhos recentes [2.79, 2.80] onde foi analisada a influência da concentração de alumínio nas transições excitônicas de poços quânticos de GaAs/AlGaAs, no intervalo de 2 a 300 K, com intensidade de excitação suficiente para blindar o efeito das flutuações de potencial, ficou evidenciado que a penetração da função de onda excitônica na região da barreira permite o

acoplamento com os fônons deste material. Existe um aumento na interação excitônica com fônons LO quando a temperatura passa de 60 K, e a energia dos fônons LO e a intensidade da interação éxciton-fônon-LO aumentam com a concentração de alumínio. Isto conduz a um maior valor da largura de linha a meia altura (FWHM) da emissão excitônica e reforça a variação do *gap* de energia com a temperatura, especialmente na região de temperaturas acima de 150 K, onde o coeficiente de variação do *gap* com a temperatura é constante ^[2.79]. Para temperaturas inferiores a 60 K a interação éxciton-fônon é determinada pelos fônons acústicos longitudinais (LA) que não dependem da concentração de alumínio.

O aumento da concentração de alumínio na liga AlGaAs provoca um maior confinamento do éxciton, assim, a função de onda excitônica penetra menos na região da barreira, e então, espera-se uma redução na largura de linha do pico de PL, uma vez que uma menor penetração da função de onda leva a uma menor interação entre o éxciton e as desordens da liga. Por outro lado, Sing e Bajaj ^[2.81] mostraram que uma maior concentração de Al na liga de AlGaAs *bulk* provoca um aumento nas flutuações de potencial, levando a uma maior largura de linha. Desta maneira, a redução esperada na FWHM pela menor interação da função de onda do éxciton com a barreira é superada pelo aumento na FWHM devido ao aumento nas flutuações da composição química da liga.

CAPÍTULO 3 – MODELOS DE AJUSTE

Apresentamos neste capítulo os modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler-ρ para o ajuste do *gap* de energia em função da temperatura, e o modelo matemático que descreve a variação do *gap* de energia com a temperatura em sistemas com flutuações de potencial.

3.1. Introdução

Na grande maioria dos materiais semicondutores, o *gap* de energia diminui com a temperatura e, em geral, possui um comportamento aproximadamente quadrático a baixas temperaturas e assintoticamente linear para temperaturas superiores a 100 K. Os mecanismos responsáveis pela redução do *gap* de energia com a temperatura são: a expansão térmica da rede (ETR) e a interação elétron-fônon (IEF) ^[3.1, 3.2]. A contribuição da dilatação térmica da rede depende do tipo do material analisado. Para as ligas GaAs e In_xGa_{1-x}As (com concentração de Índio inferior a 15 %) à temperatura ambiente, este mecanismo é responsável por cerca de 2 a 20 % ^[3.4, 3.5]. Em outros sistemas a dilatação térmica influencia de maneira mais intensa, variando de 20 a 45 % ^[3.6, 3.7]. A IEF é dividida em dois termos, ambos calculados pela perturbação da auto-energia do elétron quando os átomos do cristal sofrem um deslocamento da posição de equilíbrio. O primeiro é o chamado termo de Debye-Waller ^[3.8, 3.9], que é um efeito de segunda ordem na interação elétron-fônon, tomado em primeira ordem na teoria de perturbação ^[3.10, 3.11]. O segundo, conhecido como termo de Fan ou de auto-energia ^[3.12], é um efeito de primeira ordem na interação elétron-fônon tomado em segunda ordem na teoria de perturbação.

Uma das primeiras propostas para descrever a variação do *gap* com a temperatura foi feita por Varshni ^[3.13] em 1967, com um modelo puramente empírico. Em 1979 Viña *et al.* ^[3.1] baseados na estatística de Bose-Einstein, propuseram um modelo semi-empírico para os ajustes dos pontos experimentais. Os modelos de Varshni e Viña têm sido utilizados tanto nos ajustes do *gap* com a temperatura em semicondutores elementares ^[3.14, 3.15], em ligas binárias e ternárias ^[3.16 - 2.21], assim como para descrever o comportamento das transições excitônicas em função da temperatura em poços quânticos ^[3.22 - 3.27]. Porém, há uma grande discrepância dos resultados destes modelos de ajustes na região de baixas temperaturas ^[3.28, 3.29]. As curvas dos modelos de ajustes de Varshni e Viña passam acima e abaixo dos pontos experimentais respectivamente.

Em 1996 Pässler^[3.2, 3.29 - 3.32] desenvolveu uma série de modelos analíticos fundamentados no mecanismo de interação elétron-fônon. Os modelos propostos por Pässler foram testados com grande sucesso em uma variedade de materiais elementares^[3.30], binários^[3.29, 3.1] e poços quânticos^[3.22 - 3.27]. Atualmente é um dos modelos mais empregados nos ajustes dos pontos experimentais do *gap* de energia para materiais volumétricos e heteroestruturas semicondutoras.

3.2. Modelo de Varshni

A expressão analítica que descreve o modelo de Varshni^[3.13] é dada por:

$$E_g(T) = E_{gV}(0) - \alpha_{Var} \frac{T^2}{\beta + T}, \quad (3.1)$$

onde $E_g(0)$ é o *gap* de energia a 0 K, α_{Var} e β são coeficientes empíricos a serem obtidos através dos ajustes dos dados experimentais. O coeficiente α_{Var} está relacionado com o $\lim(dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$ e β é similar à temperatura de Debye Θ_D . O comportamento da eq. de Varshni para baixas e altas temperaturas, definidas em relação a β , pode ser estimado por^[3.13]:

$$\begin{aligned} E_g(T) &\rightarrow E_{gV}(0) - \frac{(\alpha_{Var})}{\beta} T^2 && \text{para } T \ll \beta \\ E_g(T) &\rightarrow E_{gV}(0) - (\alpha_{Var})(T - \beta) && \text{para } T \gg \beta \end{aligned} \quad (3.2)$$

Da equação 3.2 observa-se que a eq. de Varshni tem dependência quadrática para baixas temperaturas e linear para altas. Além de não descrever os pontos experimentais a baixas temperaturas, os valores numéricos de α_{Var} e β possuem grandes variações entre trabalhos científicos^[3.14, 3.15]. Pässler argumentou que o modelo de Varshni é incapaz de fornecer interpretações físicas adequadas para o comportamento da energia de recombinação excitônica com a temperatura^[3.33]. Entretanto, esse modelo ainda é muito utilizado.

3.3. Modelo de Viña

O modelo semi-empírico de Viña ^[3.1], baseado na função de distribuição de Bose-Einstein, é dado por:

$$E_g(T) = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right], \quad (3.3)$$

em que $E_{gV}(0) = E_B - a_B$ é o *gap* de energia a 0 K, a_B descreve a intensidade da interação elétron-fônon óptico e $\Theta_B = \hbar\omega/k_B$ representa a energia média dos fônons na escala de temperatura ^[3.1]. A aproximação deste modelo para baixas temperaturas definidas em relação à Θ_B é dada por ^[3.11]:

$$E_g(T) \rightarrow E_B - a_B (1 + 2 \exp(-\Theta_B/T)) = E_g(0) - 2a_B \exp(-\Theta_B/T) \quad \text{para } T \ll \Theta_B \quad (3.4)$$

Para altas temperaturas, na equação 3.3, fazendo $T \gg \Theta_B$, desenvolvendo a exponencial em série de Taylor e truncando a série no termo linear, obtemos:

$$E_g(T) \rightarrow E_B - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} T = E_g(0) - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} (T - \Theta_B/2) \quad \text{para } T \gg \Theta_B \quad (3.5)$$

Em altas temperaturas o modelo de Viña mostra um comportamento linear, assim como o modelo de Varshni. Comparando 3.5 com 3.2 obtemos que $\alpha_{var} \equiv 2a_B / \Theta_B$ e $\beta \equiv \Theta_B / 2$. Considerando a expansão por Taylor até o termo de ordem quadrática, encontramos:

$$\left[\frac{2a_B}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \cong \frac{(2a_B / \Theta_B) T^2}{T + \Theta_B / 2} \quad (3.6)$$

Tomando $\alpha_{var} \equiv 2a_B / \Theta_B$ e $\beta \equiv \Theta_B / 2$ chegamos à equação de Varshni, i. e., a eq. de Varshni é uma aproximação de segunda ordem da parte dinâmica da expressão de Viña, que é associada à interação elétron-fônon, e válida somente para a condição $\Theta_B / T \ll 1$.

A baixas temperaturas a curva de ajuste do modelo de Viña apresenta uma curvatura muito suave. Este comportamento do tipo platô surge porque o modelo de Viña considera, na média, a participação de fônons ópticos. Portanto, assim como o modelo de Varshni, o modelo de Viña apresenta problemas a baixas temperaturas.

3.4. Modelo de Pässler-p

Pässler propôs inicialmente um modelo chamado de modelo do *tipo-p* ^[3.29, 3.34], descrito pela expressão:

$$E_g(T) = E_{g_p}(0) - \frac{\alpha_p \Theta_p}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta_p}\right)^p} - 1 \right], \quad (3.7)$$

onde $\alpha_p \equiv S(\infty) = -(dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$ é um parâmetro associado à entropia do *gap* de energia em regiões de altas temperaturas, Θ_p é o parâmetro de temperatura característico representando a energia efetiva dos fônons na escala de temperatura e p é um parâmetro empírico relacionado à forma da função espectral elétron-fônon. Para o modelo de Pässler-p o grau de dispersão dos fônons é dado por $\Delta = 1/\sqrt{p^2 - 1}$. Abaixo distinguimos os seguintes regimes de dispersão:

- $\Delta < 0,30$ corresponde ao regime de baixa dispersão, em que a contribuição dos fônons de baixas energias é pequena comparada à dos fônons de altas energias.
- $0,30 < \Delta < 0,57$ é o regime de dispersão intermediária, na qual a maioria dos materiais semicondutores se encontram.
- $\Delta > 0,57$ é o regime de grande dispersão, onde a contribuição dos fônons de baixas energias (LA e TA) é comparável à contribuição dos fônons de altas energias (LO e TO).

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

$$\Delta \equiv \frac{\sqrt{\langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2}}{\langle \varepsilon \rangle} \quad (3.8)$$

A parte não linear de $E_g(T)$ pode ser relacionada como o centro de gravidade e a largura efetiva (distância quadrática média) dos modos dos fônons que contribuem de maneira significativa para a variação do *gap* com a temperatura.

Ao contrário do modelo de Varshni que prevê um comportamento quadrático da temperatura, e o de Viña que prediz o desaparecimento da dependência com T , Pässler obteve para a variação de $E_g(T)$ em materiais semicondutores, na região de baixas temperaturas, uma lei de potência do tipo $E_g(T) \propto T^p$ [3.35]. Além disso, Pässler demonstrou que três parâmetros de ajustes, como os existentes nos modelos de Varshni e Viña, são insuficientes para uma descrição apropriada da curva experimental de $E_g(T)$ [3.2]. Trabalhos publicados na literatura mostram que o modelo de Pässler-p fornece melhores ajustes dos pontos experimentais, com ajuste de mínimos-quadrados (S^2) significativamente menores em relação aos dos modelos de Varshni e Viña [3.3, 3.30, 3.36-3.38].

3.5. Modelo de Pässler- ρ

Embora o modelo de Pässler-p tenha representado um avanço no ajuste do *gap* com a temperatura, este modelo não separa as contribuições dos fônons dos diferentes ramos. Em 1998 Pässler propôs um novo modelo chamado de *Pässler- ρ* [3.32, 3.35], que estima a contribuição dos fônons dos ramos ópticos e acústicos. A equação que descreve o modelo é dada por:

$$E_g(T) = E_{g\rho}(0) - \frac{\alpha_\rho \Theta_\rho}{2} \left[\frac{\rho}{2} \left(\sqrt[4]{1 + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^2 + \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^4} - 1 \right) + (1 - \rho) \left(\coth \left(\frac{\Theta_\rho}{2T} \right) - 1 \right) \right], \quad (3.9)$$

onde $0 \leq \rho \leq 1$ controla os pesos relativos da contribuição dos fônons acústicos e ópticos. No limite de $\rho \rightarrow 1$ obtêm-se $\Theta \rightarrow \Theta_\rho / 2$ onde $\Theta = \langle \varepsilon \rangle / k_B = \Theta_\rho (1 - 0,5\rho)$ [3.32] é a temperatura efetiva dos fônons, representando a maior contribuição dos fônons acústicos. Quando $\rho \rightarrow 0$ obtêm-se $\Theta \rightarrow \Theta_\rho$ representando uma maior contribuição dos fônons ópticos. O termo

$\Theta_\rho \equiv \hbar\omega_0/k_B$ representa a energia de corte na escala de temperatura, e a relação de dispersão

para este modelo é definida por $\Delta = \frac{1}{(2-\rho)}\sqrt{\frac{\rho}{3}(4-3\rho)}$.

3.6. Análise comparativa entre os modelos de ajustes

Na Figura 3.1 mostramos o comportamento do *gap* de energia em função da temperatura para o GaAs *bulk*. Os pontos experimentais foram redigitalizados do trabalho de Grilli *et al.* [3.28], obtidos por fotoluminescência no intervalo de 3 a 300 K. As curvas de ajuste foram obtidas pelos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ .

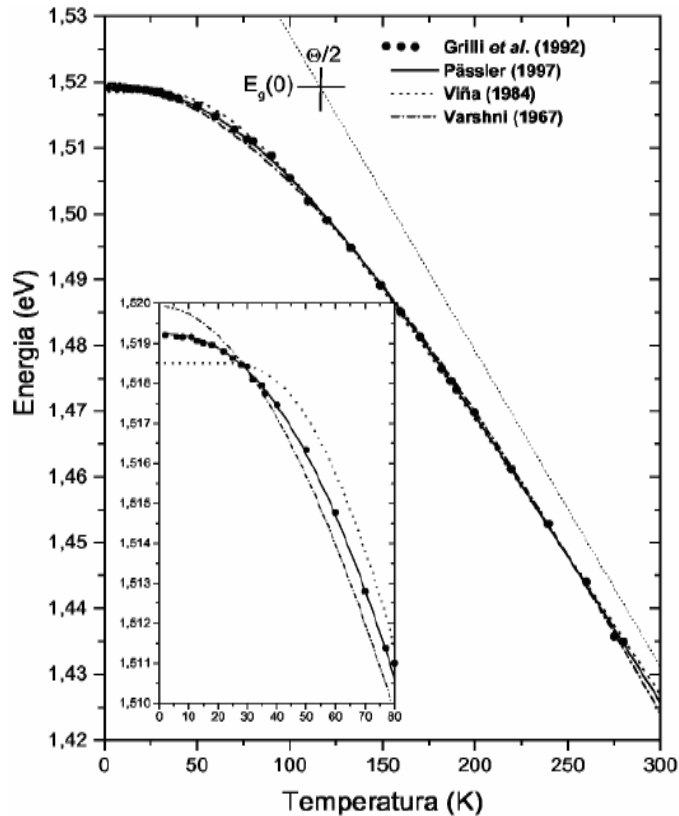


Figura 3.1. Ajustes dos pontos experimentais do *gap* de energia em função da temperatura para o GaAs, utilizando os modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ . A linha pontilhada indica a curva assintótica no limite de altas temperaturas $E_g(T) = E_g(T=0) - \alpha(T - \Theta/2)$. A intersecção 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 $\beta = \Theta/2 = 112,8\text{K}$ [3.28].

O comportamento linear para altas temperaturas previsto pelos modelos de Varshni e Viña é observado para temperaturas superiores a 100 K. Para temperaturas inferiores a 80 K (vide *inset*

na Figura 3.1) os comportamentos das curvas de ajustes destes dois modelos são diferentes entre si. Abaixo de 40 K, o modelo proposto por Varshni exhibe uma curvatura muito forte passando acima dos pontos experimentais. A curva relacionada ao modelo de Viña apresenta nessa mesma região de temperatura uma curvatura muito suave desaparecendo por completo em temperaturas inferiores a 20 K. O comportamento do tipo platô apresentado pelo modelo de Viña a baixas temperaturas não mostra qualquer dependência do tipo potência, i. e., T^p com p sendo um inteiro maior que zero. Essa diferença exibida pelos modelos de Varshni e Viña mostra que um ajuste numérico adequado dos dados experimentais do *gap* de energia em função da temperatura, para o arseneto de gálio, não é completamente satisfatório. Observa-se ainda, que os modelos de Pässler do tipo p e ρ ajustam com grande precisão os pontos experimentais em baixas e altas temperaturas.

Todos os modelos apresentados aqui não consideram explicitamente o mecanismo da expansão térmica da rede, e os parâmetros de ajustes são puramente empíricos ou semi-empíricos. Apesar de os modelos propostos por Pässler descreverem relativamente bem o comportamento do *gap* de energia em função da temperatura, ainda há carência de um modelo que considere explicitamente a IEF e a ETR, fornecendo significados físicos para todos os parâmetros obtidos dos ajustes dos pontos experimentais de $E_g(T)$.

3.7. Modelo de ajuste para sistemas com flutuações de potencial

As flutuações na largura do poço e na composição química das ligas que compõem o material do poço e barreira geram desordens que modulam o perfil local do potencial de confinamento da heteroestrutura. De acordo com a intensidade de excitação e com a magnitude das flutuações do potencial, a forma de linha do espectro de PL em função da temperatura pode apresentar dois comportamentos. Amostras com pequenas intensidades da flutuação do potencial de confinamento (sob regime de baixa excitação) apresentam um comportamento da energia do pico de PL com a temperatura conhecido como forma *blue/redshift*. A energia do pico do espectro de PL aumenta e depois diminui com o aumento gradual da temperatura. Em amostras que apresentam flutuações no regime de moderado para altas intensidades, a energia do pico de PL experimenta a chamada forma do tipo *S* invertida (*red/blue/redshift*) com a temperatura. Primeiramente o pico desloca-se para menores energias, a partir de certa temperatura (que

depende da amostra) volta a aumentar e depois diminui novamente com o aumento da temperatura.

Quando flutuações no perfil de potencial são consideradas, o comportamento do pico de PL em função da temperatura possui uma forma a baixas temperaturas que varia significativamente daquelas previstas pelos modelos de ajustes descritos anteriormente. Para realizar o ajuste, são necessárias novas considerações, que dependem das magnitudes das flutuações de potencial.

Em sistemas com baixas flutuações, como poços quânticos de GaAs/AlGaAs e ligas de ZnHgTe, as flutuações de potencial levam a uma distribuição estatística da energia de recombinação excitônica com uma distribuição do tipo gaussiana, com desvio padrão σ_E , que resulta em um alargamento da linha de emissão excitônica. A dependência do alargamento da linha na composição química da liga pode ser descrita pela seguinte relação ^[3.39, 3.40]:

$$\sigma_E = \gamma \frac{dE_g(x)}{dx} \sqrt{\frac{x(1-x)V_c}{(4\pi/3)R_{ex}^3}}, \quad (3.10)$$

onde γ é um fator menor do que um, $dE_g(x)/dx$ descreve a variação da energia de *gap* com a variação da composição química da liga, x é a concentração da liga, V_c é o menor volume no qual a modificação na composição deveria ocorrer ^[3.40]. Para uma liga perfeitamente aleatória V_c é o volume da célula unitária e R_{ex} é o raio de Bohr do éxciton.

Christen e Bimberg ^[3.41] mostraram que existe uma relação entre o *blueshift* do pico de PL (E_{PL}) com a temperatura e σ_E , cuja relação é determinada por $\sigma_E/k_B T$. Introduzindo este termo na relação que descreve a variação da energia de *gap* com a temperatura na presença de flutuações de potencial, obtemos:

$$E(T) = E_g(T) - \frac{\sigma_E^2}{k_B T}, \quad (3.11)$$

onde o termo $E_g(T)$ pode ser obtido a partir de qualquer um dos modelos de ajustes. Em nosso trabalho utilizamos o modelo de Pässler-p, que apresentou melhores ajustes em relação aos

modelos de Varshni e Viña. Assim, substituindo a equação 3.7 na eq. 3.11, chegamos à equação utilizada neste trabalho:

$$E(T) = \left\{ E_g(T=0) - \frac{\alpha\Theta}{2} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{2T}{\Theta} \right)^p} - 1 \right] - \frac{\sigma_E^2}{k_B T} \right\} \quad (3.12)$$

Na Figura 3.2 mostramos os resultados obtidos por Lourenço *et al.* [3.42] em poços quânticos de GaAs/Al_xGa_{1-x}As com diferentes concentrações de alumínio. Observa-se uma boa concordância entre os ajustes realizados pela eq. 3.12 e os pontos experimentais, que correspondem à variação do *gap* de energia com a temperatura.

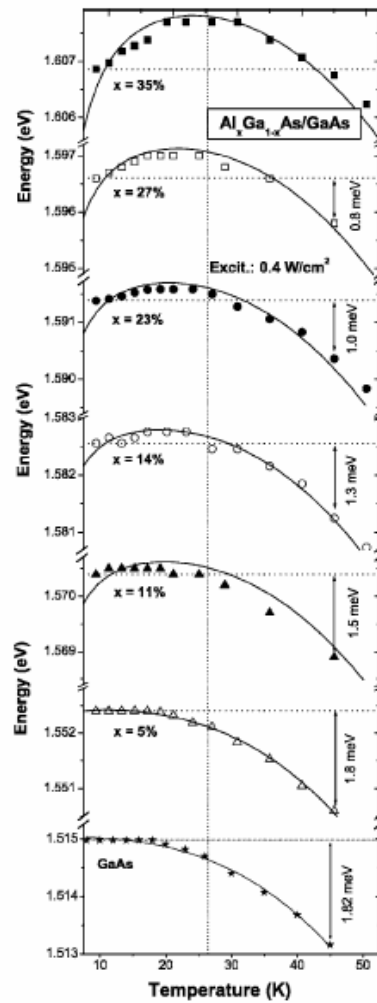


Figura 3.2. Dependência do *blueshift* do pico de PL em poços de GaAs/AlGaAs com diferentes concentrações de Al. A magnitude do *blueshift* aumenta com a concentração de alumínio [3.42].

O ajuste das curvas experimentais do *gap* de energia em função da temperatura $[E(T)]$ em amostras que apresentam o comportamento do tipo *S* invertido foi proposto primeiramente por Elissev *et al.* ^[3.43, 3.44]. A equação que descreve este modelo é dada por:

$$E(T) = E_0 - x(T)k_B T, \quad (3.13)$$

onde E_0 é o centro da função de distribuição e o segundo termo do lado direito representa os efeitos da redistribuição térmica dos portadores localizados. O coeficiente $x(T)$ é adimensional e pode ser obtido numericamente resolvendo a seguinte equação:

$$xe^x = \left[\left(\frac{\sigma}{k_B T} \right)^2 - x \right] \left(\frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \right) e^{(E_0 - E_a)/k_B T}, \quad (3.14)$$

em que σ é o parâmetro de alargamento para a distribuição dos estados localizados, τ_{tr} é o tempo de transferência dos portadores, τ_r é a taxa de recombinação radiativa dos portadores localizados, E_a representa a barreira de potencial que os portadores devem superar para serem transferidos para estados de menor energia, e é uma função da concentração de portadores e da magnitude do campo elétrico interno do material. Na Figura 3.3 apresentamos os resultados do pico de energia em função da temperatura obtidos por eletroluminescência, de diodos emissores de luz de InGaN ^[3.43]. As linhas sólidas são os resultados dos ajustes feitos pelas eq. 3.13 e 3.14.

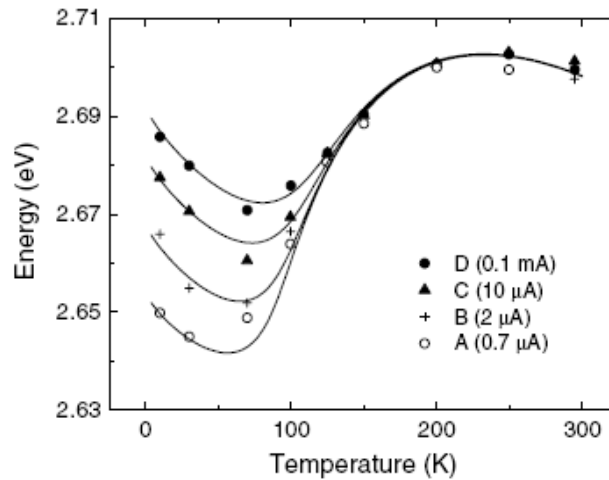


Figura 3.3. Posição do pico de eletroluminescência em função da temperatura de um LED de InGaN. Os pontos separados são os resultados experimentais e as linhas sólidas são as curvas de ajustes ^[3.43].

Na Tabela 3.1 mostramos os valores dos parâmetros utilizados nos cálculos para as diversas correntes elétricas aplicadas. Nota-se que $E_a - E_0$ varia sistematicamente com o aumento da injeção de corrente elétrica durante as medidas. Isto ocorre porque a diferença de energia entre E_a e E_0 reflete a magnitude das flutuações de potencial que aprisionam os portadores de carga.

Tabela 3.1. Parâmetros usados no ajuste dos pontos experimentais da posição do pico da Figura 3.3.

Corrente elétrica	E_0 (eV)	σ (meV)	$E_a - E_0$ (eV)	τ_{tr} / τ_r
A	2.78	31.5	- 0.126	0.06
B	2.78	31.5	- 0.112	0.04
C	2.78	31.5	- 0.098	0.04
D	2.78	31.5	- 0.088	0.04

Para regiões de altas temperaturas, quando $xe^x = \left(\frac{\tau_r}{\tau_{tr}}\right) e^{(E_0 - E_a)/k_B T} \gg 1$, a solução aproximada da eq. 3.14 é dada como:

$$x(T) \approx (\sigma/k_B T)^2, \quad (3.15)$$

então a eq. 3.13 se torna:

$$E(T) = E_0 - \frac{\sigma_E^2}{k_B T} \quad (3.16)$$

que é o modelo proposto por Elissev *et al.* [3.43].

CAPÍTULO 4 – TÉCNICAS EXPERIMENTAIS

Neste capítulo descrevemos as técnicas experimentais utilizadas neste trabalho. As técnicas são a Epitaxia por Feixe Molecular, Difratomia de raios-X de Alta Resolução e Fotoluminescência. Na seqüência são discutidos os princípios físicos da fotoluminescência e as principais transições radiativas ocorridas nos materiais volumétricos e poços quânticos. Para finalizar, descrevemos o crescimento das amostras utilizadas, os resultados obtidos da difração de raios-X, a montagem experimental da fotoluminescência e os tipos de medidas realizadas.

4.1. Epitaxia por Feixe Molecular

A técnica de Epitaxia por Feixe Molecular permite o crescimento de estruturas cristalinas de semicondutores, metais e de heteroestruturas através de feixes moleculares ou atômicos ^[4.1, 4.2]. Com esta técnica é possível crescer sólidos com espessuras definidas com precisão atômica. Isso é possível graças à baixa velocidade da deposição dos elementos químicos, da ordem de um plano cristalino ou monocamada por segundo. A técnica de MBE é de uma grande versatilidade no crescimento de semicondutores elementares como Si e Ge, binários como GaAs, AlAs, GaN, InP, GaSb, InAs, ligas ternárias tais como AlGaAs, InGaAs, GaAsSb, ligas quaternárias como InGaAsP, AlGaAsSb, e no crescimento de heteroestruturas semicondutoras.

A epitaxia por feixe molecular consiste na deposição controlada de átomos ou moléculas de determinados elementos sobre uma base cristalina (substrato) em condições de ultra-alto-vácuo (UVA) ^[4.3]. A primeira máquina de MBE (representação esquemática na Figura 4.1) foi construída em meados dos anos 50 no Laboratório da *Siemens Research*. Na época as condições de vácuo dentro da câmara de reação eram insatisfatórias (10^{-3} Pa) para um crescimento de alta qualidade, pois a condição de alto vácuo é necessária para impedir a incorporação de impurezas indesejadas como o carbono proveniente dos componentes da câmara de crescimento ^[4.4]. Dez anos mais tarde, Arthur ^[4.5] e Cho ^[4.6] no laboratório da *Bell* conseguiram obter condições de UAV com pressão de 10^{-9} Pa, para estudar aspectos fundamentais da interação de átomos de Ga e moléculas de As com substratos cristalinos de GaAs.

Para realizar o crescimento, o substrato é aquecido a uma temperatura típica de 500 a 650 °C. Elementos com alto grau de pureza, como arsênio, fósforo, gálio, índio, alumínio, silício,

ferro e berílio, são evaporados das células de efusão gerando feixes moleculares direcionados ao substrato aquecido. Os fluxos desses elementos são controlados pela ação de obturadores que podem ser acionados mecânica ou eletronicamente.

O crescimento de semicondutores durante a epitaxia é determinado pelo coeficiente de adesão dos átomos e moléculas que estão chegando à superfície do substrato ^[4.7]. No caso dos semicondutores do grupo III-V da tabela periódica, o coeficiente de adesão dos elementos do grupo III é um, enquanto que para os elementos do grupo V é meio. Assim, a velocidade de crescimento é determinada exclusivamente pela taxa de chegada dos elementos do grupo III. Foxon e Joyce ^[4.8, 4.9] estabeleceram os detalhes básicos do mecanismo de crescimento dos semicondutores III-V.

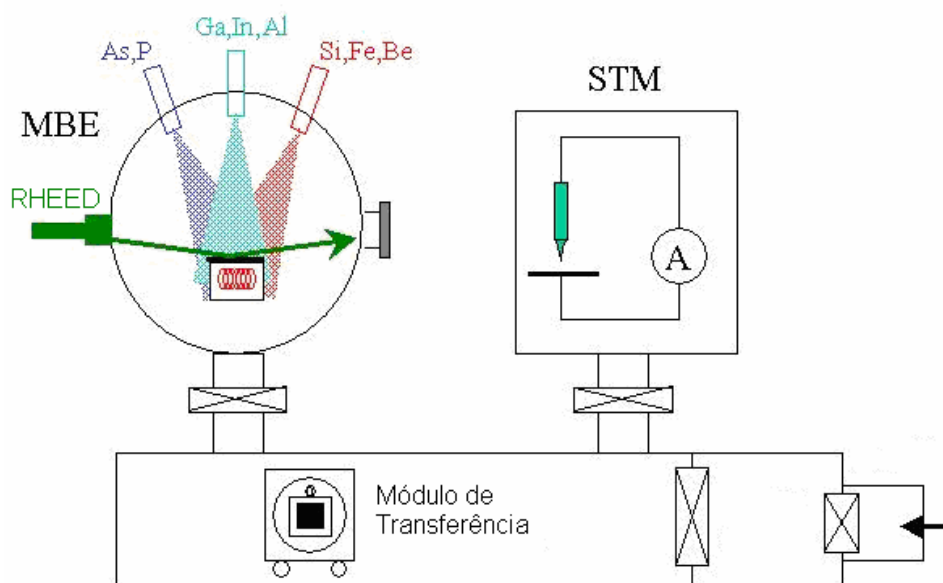


Figura 4.1. Ilustração da técnica de epitaxia por feixe molecular ^[4.10]. O substrato é colocado dentro da câmara de crescimento através de um módulo de transferência. Os elementos a serem depositados são evaporados em células de efusão direcionadas ao substrato. A dinâmica do crescimento é monitorada *in situ* pela técnica de RHEED ^[4.11, 4.12].

4.2. Difratometria de Raios-x de Alta Resolução

Diversas técnicas de difração são utilizadas para analisar a estrutura cristalina, fazendo uso das figuras de difração produzidas por radiação eletromagnética que interage com os átomos da rede, e que possuem comprimentos de onda da ordem de grandeza das distâncias interatômicas. Em essência, a difração depende da estrutura cristalina e do comprimento de onda da radiação incidente.

A difração de raios-X faz uso da incidência de raios-X sobre o alvo a ser estudado com energias no intervalo de 10 a 50 keV. As ondas eletromagnéticas de raios-X incidentes num cristal são especularmente refletidas pelos planos paralelos que refletem, cada um, apenas uma pequena fração da radiação. Os feixes difratados formam-se quando as reflexões provenientes de planos paralelos de átomos produzem interferência construtiva, conforme indicado na Figura 4.2. Considerando d a distância entre os planos paralelos, a diferença de caminho para raios refletidos por planos adjacentes será $2d\sin\theta$, onde θ é medido a partir do plano. Somente para certos valores de θ os feixes refletidos provenientes de todos os planos estarão em fase ^[4.13].

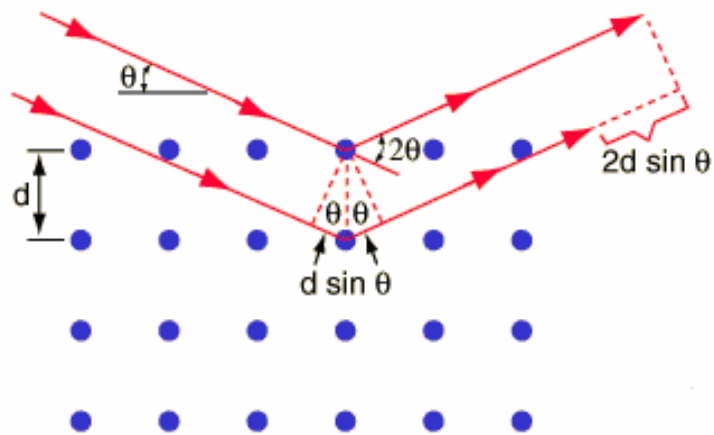


Figura 4.2. Feixes incidentes e difratados pelos planos paralelos dos átomos que compõe o cristal, onde d é distância entre dois planos atômicos ^[4.14].

A interferência construtiva da radiação proveniente de planos sucessivos ocorre quando a diferença de caminho for igual a um número inteiro n de comprimentos de onda λ :

$$n \lambda = 2d\sin\theta \quad (4.1)$$

A equação 4.1 descreve a chamada Lei de Bragg ^[4.15], que é uma consequência da periodicidade da rede.

Uma técnica de difração de raios-X utilizada no estudo de semicondutores é a chamada Difractometria de raios-X de Alta Resolução HRXRD (do inglês *High Resolution X-Ray Diffractometry*), que consiste na incidência de raios-X num cristal suspenso em uma haste giratória. A variação do ângulo θ da haste permite que a difração do feixe incidente num plano cristalino ocorra quando, durante a rotação, o valor de θ satisfazer a equação de Bragg.

Através da análise dos picos provenientes da HRXRD (intensidade, largura, distâncias entre os picos) é possível determinar parâmetros importantes em poços quânticos, como largura do poço e barreira assim como a concentração de determinado elemento. Em heteroestruturas periódicas como poços quânticos múltiplos e super-redes, esta técnica permite obter informações diretas sobre as interfaces do material e efeitos de tensão (*strain*). Para a determinação dos parâmetros, o estudo é feito via *software* específico, gerando um espectro teórico obtido a partir das informações iniciais da estrutura da amostra, que é então comparado com o espectro experimental ^[4.16].

4.3. Técnica de Fotoluminescência

Fotoluminescência PL (do inglês *Photoluminescence*) é a emissão espontânea de luz de um material sob excitação óptica. A técnica de fotoluminescência consiste na análise dos canais de recombinação radiativos do par elétron-buraco foto-excitado.

A grande versatilidade desta técnica na caracterização óptica de semicondutores permite o estudo das propriedades ópticas em função da temperatura, intensidade de excitação e campos magnéticos externos. As características dos espectros de emissão da amostra permitem identificar impurezas, desordens na composição de ligas, *gaps* de energia, rugosidade de interfaces e investigar níveis discretos de energia. Além disso é uma técnica não destrutiva e não requer preparação especial das amostras.

A PL é limitada no estudo de materiais de *gap* indireto e é difícil de se obter informações quantitativas sobre densidades de dopagem ou de impurezas ^[4.17].

4.4. Processos físicos envolvidos na fotoluminescência

Materiais semicondutores são caracterizados pela presença de uma banda de valores proibidos de energia (entre 0 e 3 eV), chamada de *gap* de energia. Com o semicondutor a temperatura de 0 K todos os elétrons encontram-se na banda de valência (BV) e todos os estados disponíveis na banda de condução (BC). Quando um fóton de energia maior que a energia de *gap* incide sobre um semicondutor de *gap* direto, um elétron é promovido para a banda de condução, e um buraco é gerado na banda de valência. Se o fóton incidente possui energia maior que o *gap*

de energia do material, elétrons e buracos terão um excesso de energia em relação ao estado fundamental de suas respectivas bandas. Estes portadores sofrem um decaimento intrabanda através de transições não-radiativas (com emissão de fônons), até que os elétrons atinjam o mínimo da banda de condução e os buracos o máximo da banda de valência. Finalmente elétrons e buracos recombinam emitindo fótons de energia igual ao valor do *gap* do material ^[4.18]. O processo é representado na Figura 4.3.

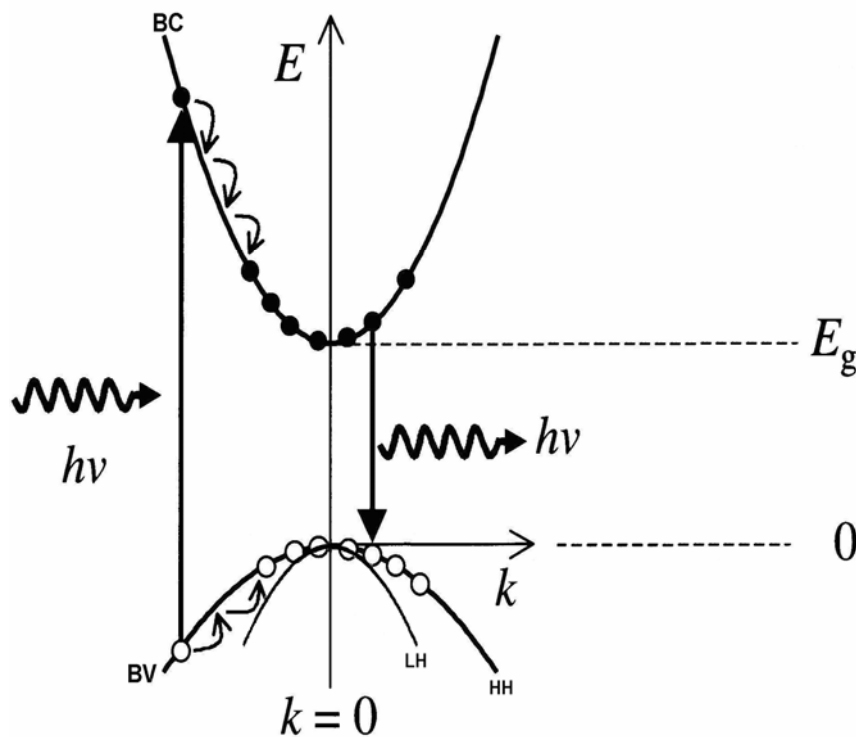


Figura 4.3. Representação da estrutura de bandas de um semicondutor de *gap* direto. Fótons de energia $h\nu > E_g$ excitam elétrons da banda de valência para a banda de condução. Na seqüência os portadores de carga relaxam para os mínimos de suas respectivas bandas pela emissão de fônons. Cada seta indica a emissão de um fônon. Então, elétrons e buracos recombinam emitindo um fóton de energia igual à energia de *gap* ^[4.18].

4.4.1. Transições em semicondutores *bulk*

4.4.1.a. Emissão de éxcitons livres

Quando um elétron é excitado para a BC, este pode ligar-se eletrostaticamente a um buraco da BV formando um éxciton. O éxciton pode ser entendido como uma estrutura hidrogenóide em um meio com uma constante dielétrica ϵ e descrito pelo modelo de Bohr. A energia potencial do sistema é dada por:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (4.2)$$

onde r é a distância média que separa as cargas. A massa do sistema elétron - buraco é descrita em termos da massa reduzida:

$$\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}, \quad (4.3)$$

onde m_e^* e m_h^* são as massas efetivas dos elétrons e buracos respectivamente. Resolvendo a eq. de Schrödinger utilizando o potencial e a massa definidos acima, encontramos que a energia de ligação (E_{excn}) e o raio do éxciton (a_n) são dados por:

$$E_{\text{excn}} = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{e^4}{\epsilon^2} \quad (4.4)$$

$$a_n = n^2 \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 \mu} \quad (4.5)$$

Utilizando os valores dos parâmetros do GaAs, a energia de ligação excitônica a 10 K é de 4,2 meV com um raio de Bohr de 120 Å [4.19].

Ao ocorrer a recombinação excitônica, um fóton é emitido com a energia:

$$h\nu = E_g^{\text{bulk}} - E_{\text{excn}}, \quad (4.6)$$

onde E_g^{bulk} é o *gap* de energia do material *bulk* e E_{excn} é a energia de ligação do éxciton. Na Figura 4.4(a) representamos os níveis excitônicos em um material volumétrico, e na Figura 4.4(b) mostramos a transição excitônica [4.20].

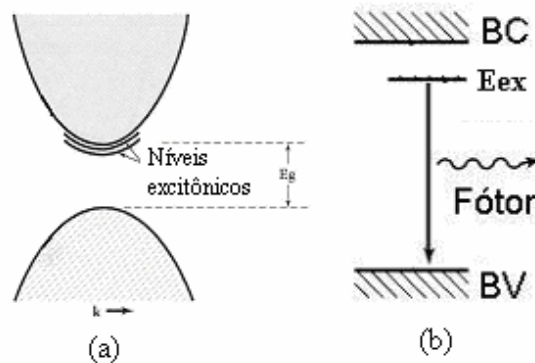


Figura 4.4. (a) Níveis excitônicos em um semicondutor *bulk* mostrando os dois primeiros níveis de energia. (b) Transição excitônica em material volumétrico ^[4.20].

4.4.1.b. Transição banda a banda

A transição banda a banda ocorre entre um elétron da BC e um buraco da BV, sendo estes portadores livres (não há formação de éxciton). A Figura 4.5 ilustra esse processo ^[4.20].

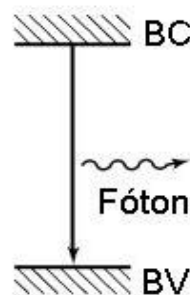


Figura 4.5. Ilustração da transição banda a banda em um semicondutor volumétrico envolvendo um elétron e um buraco livres ^[4.20].

Em geral, as transições banda a banda passam a ser observadas a partir de certa temperatura (no caso do GaAs aproximadamente 50 K) pois a baixas temperaturas as transições excitônicas são predominantes ^[4.21 - 4.23].

4.4.1.c. Transição envolvendo éxcitons ligados

Durante o crescimento de um cristal, impurezas podem ser incorporadas intencionalmente ou não. Estas impurezas podem ser neutras ou ionizadas, fazendo com que éxcitons livres liguem-se eletrostaticamente a elas. A energia da emissão de um éxciton ligado BE (do inglês

Bound Exciton) sempre é menor do que a de um éxciton livre ^[4.20], sendo caracterizada por um pico estreito. Uma largura de linha de 0,1 meV foi encontrada para éxcitons ligados a impurezas rasas no GaAs ^[4.24].

4.4.1.d. Transição banda-impureza

A transição de um elétron da banda de condução para um nível aceitador (E_a), ou entre um elétron de um nível doador (E_d) e um buraco da banda de valência é denominada transição banda-impureza. A Figura 4.6 representa essas transições.

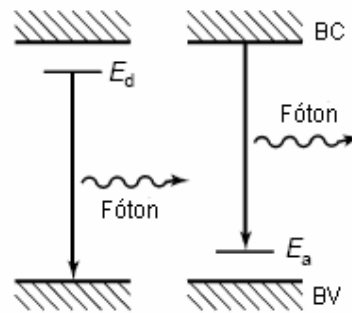


Figura 4.6. Representação esquemática da transição entre um elétron do nível doador para um buraco na banda de valência, e de um elétron da banda de condução para o nível aceitador ^[4.20].

A energia do fóton emitido é dada por:

$$h\nu = E_g^{bulk} - E_d \quad (4.7)$$

ou

$$h\nu = E_g^{bulk} - E_a, \quad (4.8)$$

onde E_d é a energia de ligação da impureza doadora e E_a a energia de ligação da impureza aceitadora ^[4.20].

4.4.1.e. Recombinação doador-aceitador

Esta recombinação corresponde à transição entre um elétron do nível doador para o nível aceitador, como mostrado na Figura 4.7. O fóton emitido neste processo tem energia igual a:

$$h\nu = E_g^{bulk} - [E_d + E_a] + e^2/\epsilon r, \quad (4.9)$$

onde $e^2/\epsilon r$ é o termo associado à energia de emparelhamento entre o par ligado; r é a distância média entre o par ligado e ϵ é a constante dielétrica relativa do material ^[4.20].

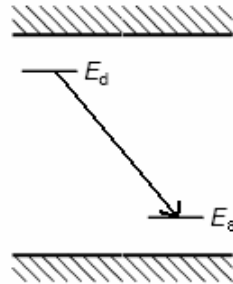


Figura 4.7. Transição de um elétron do nível doador para o nível aceitador ^[4.20].

4.4.2. Transições excitônicas no poço quântico

No poço quântico, o éxciton sofre o efeito do confinamento, com a redução do seu raio de Bohr o que leva a um aumento de sua energia de ligação em relação ao *bulk*. Assim, é possível observar transições excitônicas até temperatura ambiente ^[4.25].

Para baixas intensidades de excitação e baixas temperaturas, só é possível transições envolvendo o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco pesado, porque não há energia térmica suficiente para excitar o nível de buraco leve. Eventuais buracos que ocupem o nível de lh relaxam não radiativamente para o nível de buraco pesado e então ocorre a recombinação elétron-buraco pesado. Como mostrado no capítulo 2, em materiais volumétricos como GaAs, os níveis de energia dos buracos pesados e leves são degenerados no máximo da banda de valência. Em poços quânticos, o confinamento dos portadores provoca um levantamento da degenerescência dos buracos pesados e leves respectivamente, permitindo observar nos espectros de PL separadamente as transições entre elétrons e buracos pesados e buracos leves.

Assim como em materiais volumétricos, elétrons e buracos podem se ligar eletrostaticamente formando éxcitons, com níveis de energia que se encontram abaixo do nível de elétron, tomando o topo da banda de valência como referência. O éxciton pode ser formado pela ligação entre o elétron com o buraco pesado ou com o buraco leve, e quando ocorre a recombinação do par elétron-buraco, um fóton será emitido com a energia:

$$h\nu_{hh} = E_g^{bulk} + E_n + E_{hhm} - E_{ex(hh)} \quad (4.10a)$$

ou

$$h\nu_{lh} = E_g^{bulk} + E_n + E_{lhm} - E_{ex(lh)} \quad (4.10b)$$

onde E_n é a energia do n -ésimo nível de energia de confinamento do elétron, E_{hhm} e E_{lhm} são os m -ésimos níveis de energias do buraco pesado e buraco leve respectivamente, e E_{ex} é a energia de ligação do éxciton relacionada ao buraco pesado (hh) ou leve (lh).

Os resultado do cálculo teórico da energia de ligação excitônica em poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos na direção [100], em função da largura do poço e para algumas concentrações de alumínio são apresentados na Figura 4.8. Foram usados os modelos do poço de potencial finito e infinito ^[4.26]. Notamos que a energia de ligação excitônica depende da concentração de alumínio e da largura do poço (L). Para um valor fixo da concentração de alumínio x , o valor da energia de ligação aumenta até certo valor de L , a partir do qual passa a diminuir com o aumento da espessura do poço. A razão para este comportamento é simples. Quando a largura do poço é aumentada a partir de valores muito pequenos, a função de onda do éxciton penetra menos na barreira, e a energia do éxciton aumenta até certo valor de L . A partir deste ponto, já não existe mais interação da função de onda do éxciton com a barreira, e quando se aumenta ainda mais a largura do poço, a energia de ligação do éxciton começa a diminuir.

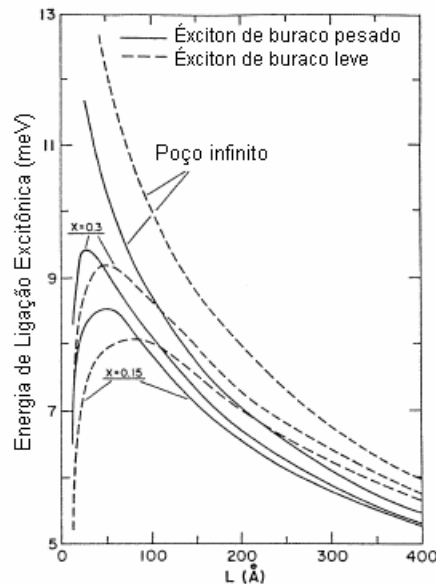


Figura 4.8. Variação da energia de ligação excitônica de éxcitons de buracos pesados (linhas sólidas) e éxcitons de buracos leves (linhas pontilhadas), em função da largura do poço em poços quânticos de GaAs/Al_xGa_{1-x}As para $x = 0,15$ e $0,3$, usando os modelos de poço de potencial finito e infinito ^[4.26].

Brandt *et al.* ^[4.27] através de medidas de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação em poços quânticos de GaAs/Al_{0,33}Ga_{0,67}As crescidos na orientação [311]A, com largura nominal do poço de 100 Å, obtiveram o valor de 10 meV para a energia de ligação do éxciton relacionado ao buraco pesado, e de 12,3 meV para buraco leve. Comparando este resultado com poços de mesmos parâmetros, mas crescidos na direção [100] ^[4.28, 4.29], Brandt sugeriu que a energia de ligação excitônica dentro do erro experimental, é a mesma entre as direções [100] e [311]A.

4.5. Descrição das amostras utilizadas

As amostras estudadas neste trabalho foram preparadas no equipamento de MBE do Departamento de Física da Universidade de *Arkansas* – U.S.A. O conjunto é composto por três amostras de poços quânticos múltiplos de Al_xGa_{1-x}As/GaAs crescidos sobre diferentes orientações. Os substratos de GaAs não dopados e orientados nas direções [100], [311]A e [311]B, foram mantidos por 10 minutos à temperatura de 580 °C sob fluxo de As₄ para remover óxidos oriundos das superfícies. Na seqüência, a temperatura do substrato foi elevada a 600 °C para realizar o crescimento. Sobre os substratos foram crescidos, simultaneamente, uma camada *buffer* constituída por uma camada de GaAs com espessura de 0,1 µm. Após esta camada, 20 MQWs de GaAs/Al_{0,36}Ga_{0,64}As com largura nominal do poço e barreira de 55 Å e 285 Å respectivamente foram crescidos, e para encerrar as heteroestruturas, uma camada tampão de GaAs com 60 Å foi depositada. Os dados nominais do crescimento são referentes à direção [100]. A Figura 4.9 mostra a estrutura das amostras.

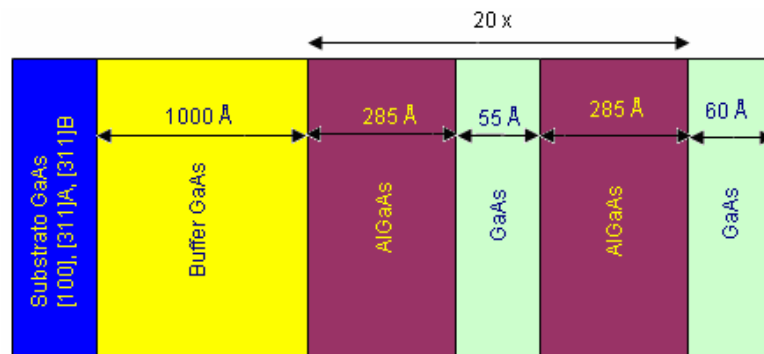


Figura 4.9. Representação esquemática da estrutura dos poços quânticos múltiplos crescidos nas diferentes orientações. Os dados nominais referem-se à direção [100].

Ao realizar o crescimento simultâneo de poços quânticos sobre substratos com diferentes orientações, a concentração de alumínio, largura dos poços e das barreiras variam em relação aos valores obtidos para estes parâmetros na direção [100] [4.30, 4.31]. Para determinar estes parâmetros, utilizamos a técnica de HRXRD disponível no Laboratório de Óptica de raios-X e Instrumentação (LORXI) do Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná - UFPR. As medidas de raios-X foram feitas com um feixe de radiação preparado com quatro cristais de Ge(220) ($\lambda = \text{CuK}_{\alpha 1}$) com energia de 8 keV.

A Figura 4.10 mostra o perfil experimental e teórico dos ajustes dos espectros de raios-X obtido para as diferentes orientações. Os resultados destas medidas para a concentração de alumínio (%Al), largura dos poços (L_W) e barreiras (L_B) são mostrados na tabela 4.1.

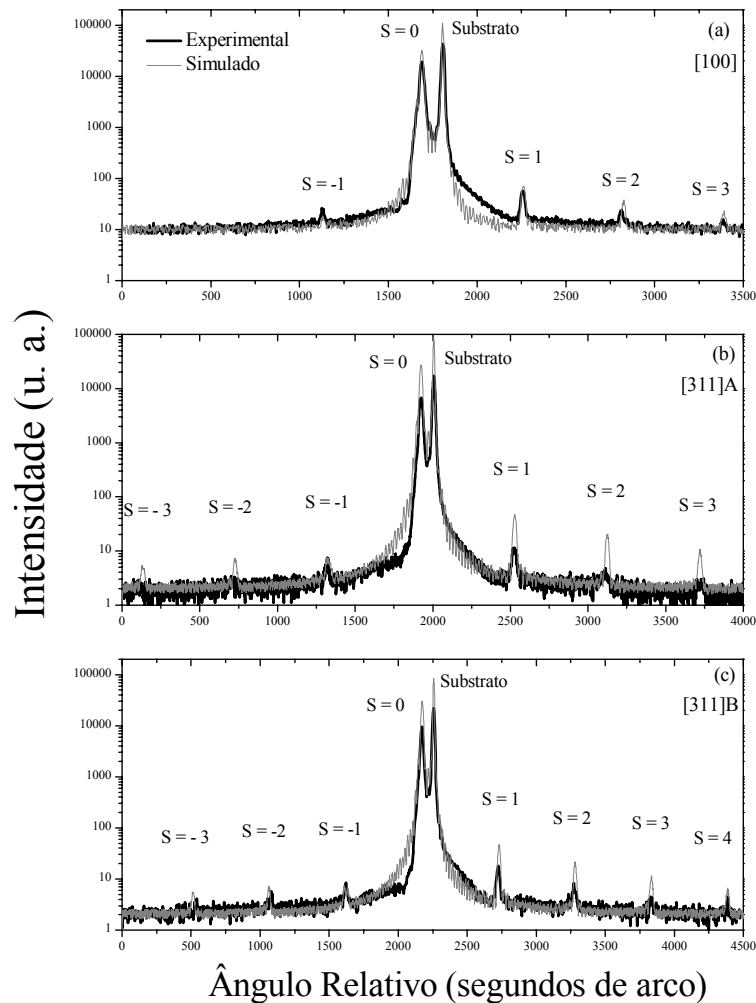


Figura 4.10. Perfil teórico e experimental dos melhores ajustes para os poços quânticos múltiplos crescidos sobre as direções (a) [100], (b) [311]A e (c) [311]B do substrato de GaAs. Os picos satélites são identificados por S_n , onde n indica a ordem.

Tabela 4.1. Valor dos parâmetros dos poços quânticos obtidos por HRXRD.

Orientação	% Al	L_W (Å)	L_B (Å)
[100]	36 ± 1	55 ± 2	285 ± 11
[311]A	33 ± 1	52 ± 1	256 ± 5
[311]B	34 ± 1	47 ± 1	275 ± 6

4.6. Descrição do arranjo experimental da técnica de fotoluminescência

A caracterização óptica foi realizada pela técnica de fotoluminescência do Laboratório do Grupo de Óptica e Opto-Eletrônica (GOO) do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina (UEL).

Uma representação esquemática do sistema de fotoluminescência utilizado está indicada na Figura 4.11.

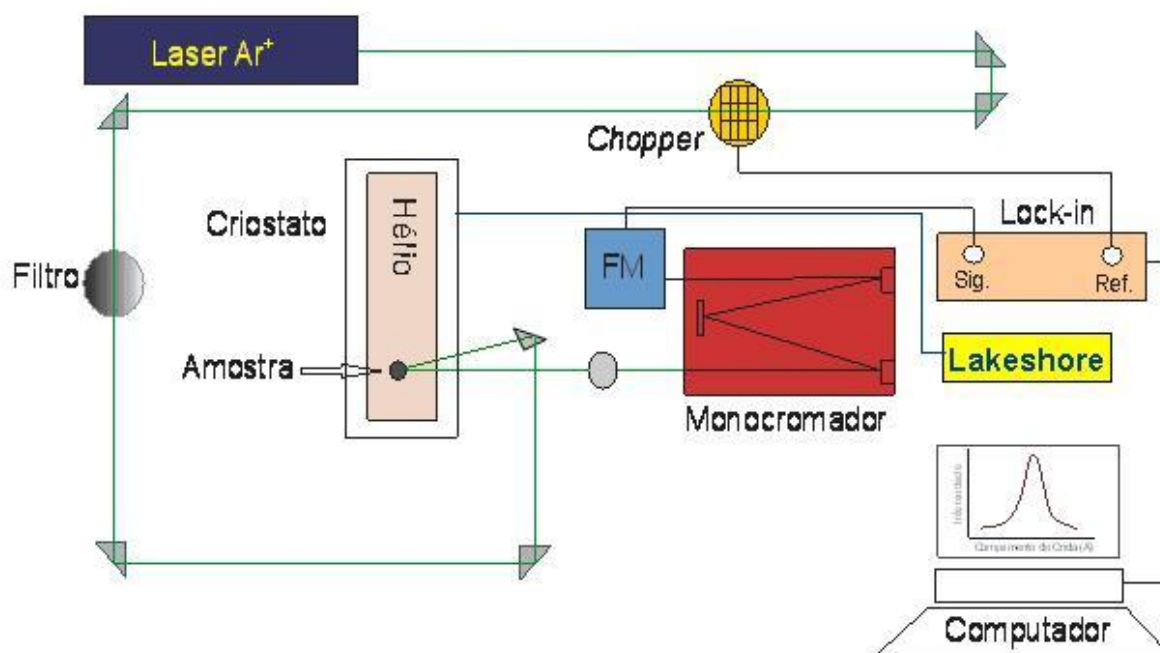


Figura 4.11. Representação esquemática do sistema de Fotoluminescência.

A excitação das amostras foi feita por meio de um laser de Argônio da marca *Coherent Innova 70C-5* de 5 W, com linha de 514,5 nm modulada por um *chopper* à frequência de 200 Hz. Para uma corrente elétrica de 20 A, o *spot* do laser é estimado em 121 μm . A intensidade de

excitação é controlada por meio de filtros de densidade neutra colocados no caminho óptico do laser. As amostras são fixas em um porta amostras dentro de um criostato fechado de hélio (Janis, modelo CCS – 150) acoplado a um sistema de vácuo composto por uma bomba mecânica e outra turbo molecular. Os espectros de PL foram obtidos por meio de um monocromador *Jarrell-Ash* 0,5 m com grade de difração de 600 linhas/mm com *blaze* em 12000 Å, movida por um motor de passo para fazer a varredura no comprimento de onda, com uma resolução de aproximadamente 0,5 eV. Um filtro OG-530 foi utilizado para eliminar a radiação proveniente do laser. Uma célula fotomultiplicadora (FM) de arseneto de gálio detecta e envia o sinal para um *lock-in* (Modelo SR 510 – *Amplifier Stanford Research Systems*), que transmite o sinal para um amplificador, e finalmente repassa para o sistema de aquisição, analisado por meio de um *software* feito especialmente para este caso. A temperatura é controlada por um sistema *Lakeshore* modelo 331.

Neste trabalho empregamos a técnica de fotoluminescência em função da temperatura e da intensidade de excitação, para estudar as transições ópticas nos materiais componentes da camada *buffer* (GaAs), das barreiras (AlGaAs) e dos poços quânticos em diferentes orientações cristalográficas.

CAPÍTULO 5 – RESULTADOS E DISCUSSÃO: GaAs e Al_xGa_{1-x}As VOLUMÉTRICOS

Apresentamos neste capítulo os resultados experimentais de fotoluminescência em função da temperatura e intensidade de excitação do binário GaAs e da liga AlGaAs. O GaAs é o material constituinte das camadas *buffer* e dos poços quânticos, enquanto o AlGaAs volumétrico compõe as barreiras das amostras. Os picos dos espectros de fotoluminescência são avaliados em função da orientação do substrato.

5.1. GaAs *bulk*

Na Figura 5.1 mostramos os espectros de PL à temperatura de 12 K e com intensidade de excitação de 16 W/cm² obtidos das camadas *buffer* de GaAs para todas as orientações. Os picos em torno de 1,512 eV são associados às transições de éxcitons ligados a aceitadores neutros (AX), e os picos mais intensos em torno 1,515 eV são relacionados ao primeiro nível de éxciton livre [5.1].

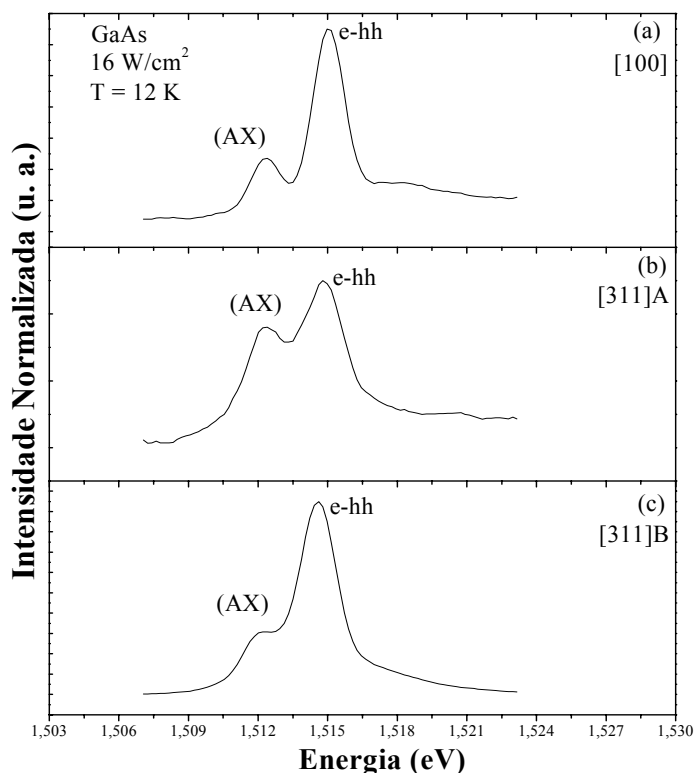


Figura 5.1. Espectros de PL a 12 K do GaAs *bulk* nas orientações (a) [100], (b) [311]A e (c) [311]B, onde e-hh é o primeiro nível de éxciton livre, e (AX) é a transição associada a éxcitons ligados a aceitadores neutros.

Os resultados de fotoluminescência da figura anterior mostram que os picos referentes as transições observadas no GaAs não variam com a orientação do substrato, o que concorda com o trabalho de Xu e colaboradores [5.2].

5.2. AlGaAs *bulk*

Na Figura 5.2 mostramos os espectros de fotoluminescência a 20 K com intensidade de excitação de 275 W/cm^2 , das camadas de AlGaAs que constituem as barreiras das amostras. Para intensidades de excitação e temperaturas inferiores a estas, somente os picos associados às transições envolvendo impurezas são observados. Nestes espectros são identificadas as seguintes transições respectivas às direções [100], [311]A e [311]B: transição banda a banda (BB) em 2,017, 2,010 e 2,020 eV, emissão de éxcitons ligados (BE) em 1,993, 1,990 e 1,966 eV, e transição elétron-carbono (e, C) em 1,969, 1,985 e 1,925 eV.

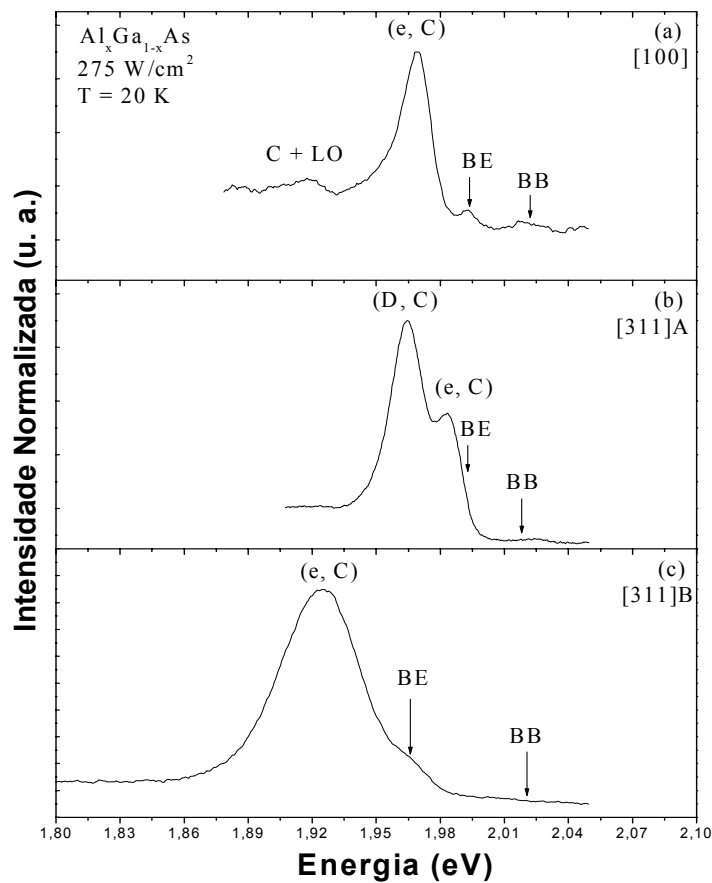


Figura 5.2. Espectros de PL a 20 K do AlGaAs volumétrico com intensidade de excitação de 275 W/cm^2 , para todas as orientações.

São identificados ainda, um pico em 1,918 eV, associado provavelmente à transição envolvendo réplica de fônons ópticos com emissão do carbono aceitador (C + LO) na amostra crescida na direção [100], e na estrutura com orientação [311]A emissões entre pares doador-aceitador (carbono), em 1,966 eV, sendo o doador não identificado ^[5.3 - 5.6].

Na Tabela 5.1 apresentamos os valores das energias para todos os picos identificados, em função da orientação do substrato e de cada uma das concentrações de alumínio determinadas por difração de raios-X. Devido ao crescimento simultâneo, a incorporação, difusão e adesão dos elementos químicos variam de acordo com a orientação do substrato (capítulo 2). Pode ser verificado, pelos resultados obtidos com a técnica de difração de raios-X, que as amostras incorporam diferentes quantidades de alumínio devido ao crescimento simultâneo nas diferentes orientações.

Tabela 5.1. Valores das energias das transições banda a banda (B-B), éxciton ligado (BE), elétron-carbono aceitador (e, C), doador-aceitador (D, C) e transição envolvendo réplicas de fônons ópticos e carbono aceitador (C + LO). Os valores das concentrações de alumínio são determinados pela técnica de difração de raios-X.

Orientação	% Al	B-B (eV)	BE (eV)	(e, C) (eV)	(D, C) (eV)	(C + LO) (eV)
[100]	36 ± 1	2,017	1,993	1,969	-----	1,918
[311]A	33 ± 1	2,010	1,990	1,985	1,966	-----
[311]B	34 ± 1	2,020	1,966	1,925	-----	-----

Na Figura 5.3 mostramos o comportamento dos espectros de PL do AlGaAs em função da intensidade de excitação a 12 K nas diferentes orientações. Na amostra crescida na orientação [100], o espectro com a menor intensidade de excitação apresenta apenas um pico referente à transição elétron-carbono (1,969 eV). Ao aumentar a intensidade de excitação fica evidente a presença dos picos relacionados a transições envolvendo éxcitons ligados (1,993 eV), transições banda a banda (2,017 eV) e transições envolvendo réplica de fônons ópticos com emissão associada ao carbono aceitador (1,918 eV). Na Figura 5.3(b) são apresentados os espectros da amostra crescida na orientação [311]A. O pico mais intenso devido à transição doador-aceitador (1,966 eV) está presente para todas as intensidades de excitação. À medida que se aumenta a intensidade de excitação, os picos devido às transições elétron-carbono (1,985 eV) e éxcitons ligados (1,990 eV) passam a predominar sobre o pico associado à transição doador-aceitador. Os espectros da amostra crescida na direção [311]B são mostrados na Figura 5.3(c). O pico mais

intenso é associado à transição elétron carbono (1,925 eV). Próximo a este pico, é observado ainda um pico relacionado a transição de éxciton ligado (1,990 eV).

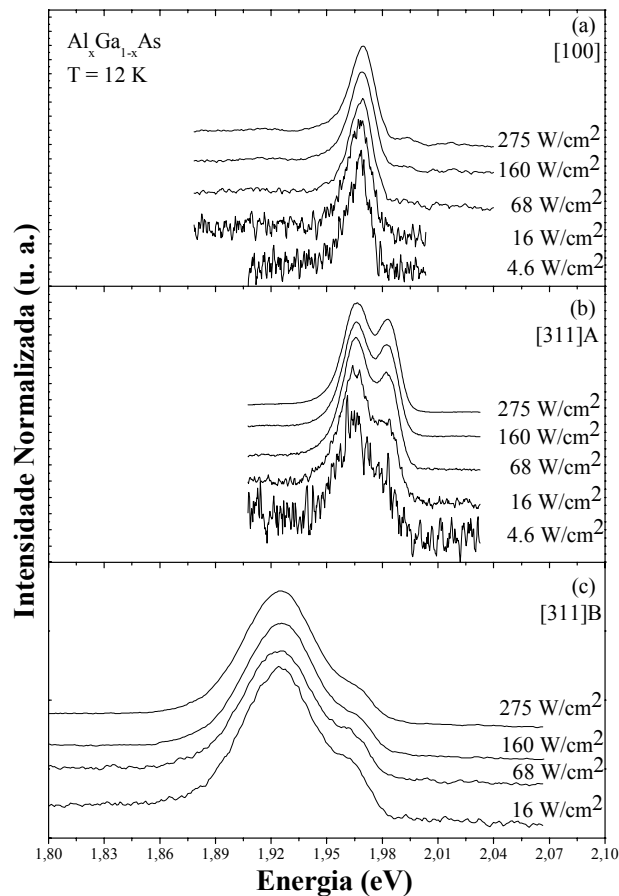


Figura 5.3. Espectros de PL a 12 K em função da intensidade de excitação do AlGaAs nas orientações (a) [100], (b) [311]A e (c) [311]B.

Na Figura 5.4 apresentamos os espectros de PL do AlGaAs em função da temperatura das amostras, com intensidade de excitação de 275 W/cm^2 . Com o aumento da temperatura, os picos associados às transições banda a banda nas amostras [100] (2,017 eV) e [311]A (2,010 eV) têm suas intensidades elevadas em relação aos picos associados às transições envolvendo impurezas. O pico associado à transição banda a banda (2,020 eV) na orientação [311]B não fica evidente mesmo com o aumento da temperatura / e ou intensidade de excitação [Fig. 5.3(c)]. Nessa amostra a quantidade de carbono incorporada durante o crescimento é muito maior em relação às demais amostras. Isto ocorre devido à maior afinidade para incorporação de impurezas, como o carbono, na orientação [311]B, associada à existência de pares de ligações pendentes na superfície com esta orientação ^[5.7]. Isto faz com que a transição elétron-carbono predomine

mesmo para altas temperaturas e maiores intensidades de excitação. Assim, a temperatura para a qual observaríamos o pico associado à transição banda a banda deveria ser maior do que 40 K [Fig. 5.4(c)], porém, a partir desta temperatura a luminescência emitida pela barreira de AlGaAs não é suficiente para observar as transições estudadas.

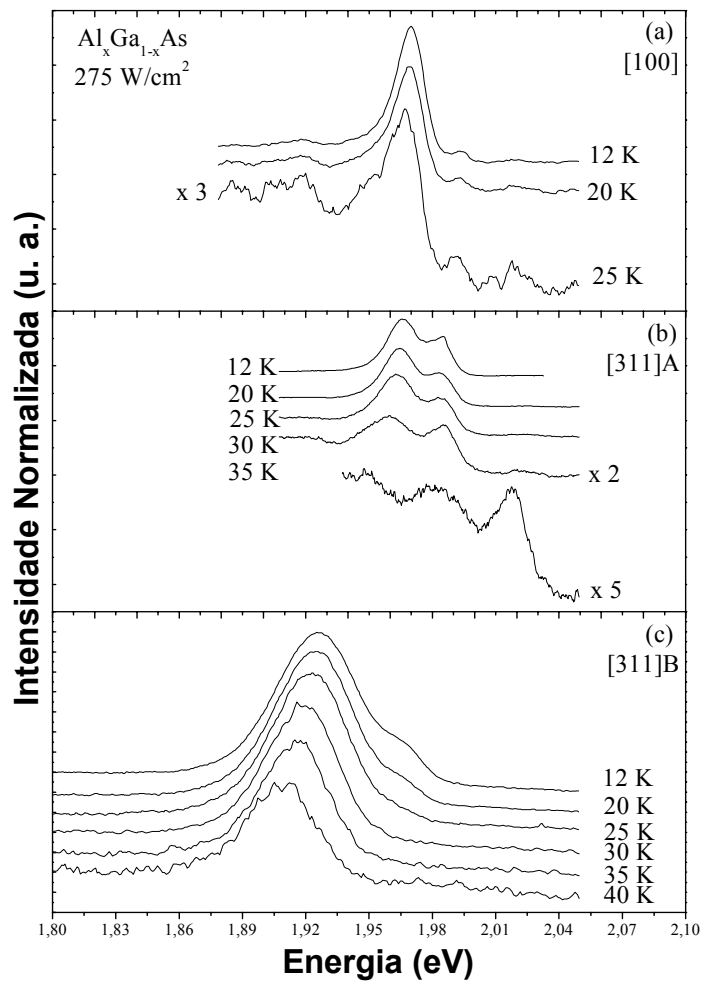


Figura 5.4. Espectros de PL a 275 W/cm^2 em função da temperatura dos AlGaAs crescidos nas orientações (a) [100], (b) [311]A e (c) [311]B.

Na Figura 5.4(a) observa-se que a transição elétron-carbono tem sua intensidade reduzida com o aumento da temperatura. Comportamento semelhante é observado para a transição doador-aceitador na amostra [311]A [Fig. 5.4(b)], onde esta transição é superada pelas transições associadas à elétron-carbono e éxcitons ligados quando ocorre um aumento da temperatura. Na amostra crescida na orientação [311]B [Fig. 5.4(c)] verificamos que a transição devida a éxcitons ligados desaparece com o aumento da temperatura, e que a transição associada a elétron-carbono permanece muito intensa mesmo para temperaturas mais elevadas.

5.2.1. Análise das transições banda a banda

Através do estudo do comportamento dos picos associados às transições banda a banda em função da intensidade de excitação e temperatura, verificamos experimentalmente que essas transições têm suas intensidades aumentadas em relação às transições envolvendo impurezas. Isto ocorre porque com o aumento da intensidade de excitação / e ou temperatura, os níveis de energia das impurezas são saturados, e o que passa a predominar é a transição banda a banda.

Na Figura 5.5 mostramos a variação da energia da transição banda a banda no AlGaAs com a concentração de alumínio obtida por Bosio *et al.* [5.8]. Os valores das energias da transição banda a banda encontradas em nossas amostras (Tabela 5.1) estão de acordo com este trabalho, para as respectivas concentrações de alumínio de cada amostra.

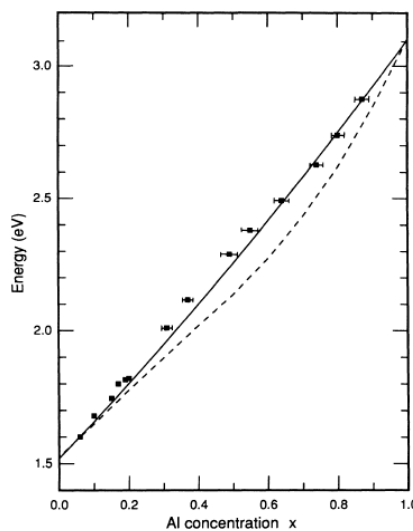


Figura 5.5. Variação da energia da transição banda a banda em função da concentração de alumínio no AlGaAs [5.8].

5.2.2. Análise das transições envolvendo impurezas na orientação [100]

Na Figura 5.6(a) mostramos o gráfico com valores experimentais das energias de transição associadas à impurezas em função da concentração de alumínio da liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crescida na direção [100] [5.3]. Em $x = 0,36$ a energia para éxcitons ligados (BE) é de 1,993 eV. No espectro da Figura 5.2(a), observamos a presença de um pico com esta mesma energia, cuja intensidade se reduz a zero quando a intensidade de excitação é reduzida [Fig. 5.3(a)] ou a temperatura elevada [Fig. 5.4(a)]. Assim, associamos este pico à transição de éxcitons ligados. O valor da energia devido à transição envolvendo elétron-carbono aceitador é de 1,964 eV em $x =$

0,36. No espectro da Figura 5.2(a) o pico mais intenso está em 1,969 eV, e observamos que o aumento da temperatura faz com que a intensidade deste pico diminua. Estas duas evidências permitem associar este pico à transição elétron da banda de condução para carbono aceitador (e, C).

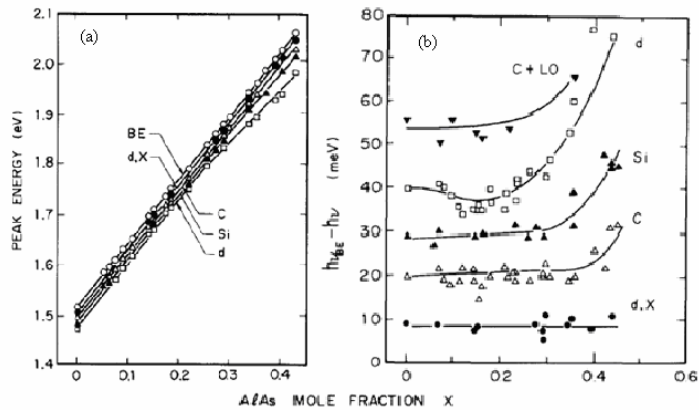


Figura 5.6 (a) Energia do pico de PL a 4 K como função da fração molar x . Os pontos experimentais correspondem aos picos de emissão devido a éxcitons ligados (BE), éxcitons ligados a defeitos (d, X), elétron-carbono aceitador (C), silício aceitador (Si) e defeitos complexos (d). (b) Diferença de energia entre picos associados a éxcitons ligados e outros picos como função da concentração de alumínio ^[5.3].

Na Figura 5.6(b) mostramos a diferença de energia entre a transição de éxcitons ligados e demais transições envolvendo impurezas em função da concentração de alumínio ^[5.3]. A diferença de energia entre o éxciton ligado e o carbono aceitador é de 24 meV. Na Figura 5.2(a) há um pico devido à transição associada a éxcitons ligados, e outro pico devido à transição elétron-carbono. A diferença de energia entre esses dois picos é de aproximadamente 24 meV, o que confirma a análise das transições observadas em nossas amostras para a respectiva concentração de alumínio.

Na amostra crescida na direção [100] no lado de menor energia há um pico em 1,918 eV, que encontra-se a 75 meV do pico associado a éxcitons ligados. De acordo com o gráfico 5.6(b), este pico é devido à transição envolvendo réplica de fônons ópticos e emissão associada ao carbono aceitador.

5.2.3. Análise das transições envolvendo impurezas nas orientações [311]

Na Figura 5.7 apresentamos os resultados de fotoluminescência obtidos por Galbiati *et al.* ^[5.5, 5.6] para amostras de AlGaAs crescidas nas orientações [311]A e [311]B. Nota-se que o

espectro da Figura 5.7(a) possui forma de linha semelhante ao espectro da Figura 5.2(b), exceto pelo ombro associado à transição envolvendo o silício. Em comparação ao trabalho de Galbiati e colaboradores, identificamos os picos na amostra [311]A associados às transições envolvendo éxcitons ligados, elétron-carbono aceitador e doador-aceitador, sendo o doador não identificado e o aceitador, o carbono.

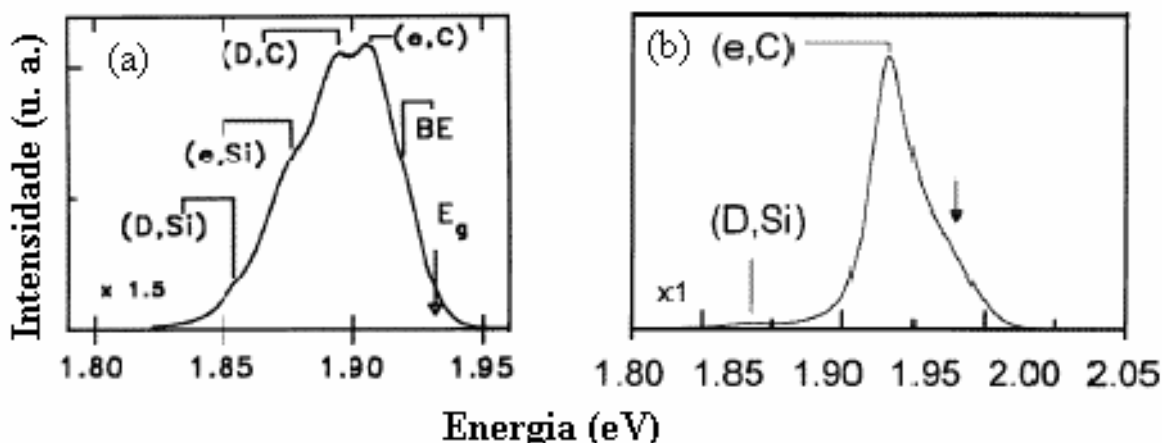


Figura 5.7. Espectros de fotoluminescência a 12 K de amostras de AlGaAs dopadas com silício crescidas nas orientações (a) [311]A com concentração de alumínio de 0,28 e de silício de $10^{15} / \text{cm}^3$, (b) [311]B com % Al de 0,32 e de alumínio de $10^{18} / \text{cm}^3$ [5.4, 5.5].

No espectro da Figura 5.7(b) mostramos os resultados de fotoluminescência para a amostra de $\text{Al}_{0,32}\text{Ga}_{0,68}\text{As}$ crescida na orientação [311]B. Observa-se a presença de um pico no lado de maior energia, destacado por uma flecha, associado à emissão de éxcitons ligados. O pico mais intenso é devido à transição elétron-carbono aceitador. Através da comparação entre os espectros da Fig. 5.2(c) e 5.7(b), observa-se que ambos possuem uma forma de linha muito parecida, o que nos permite associar o pico no lado de maior energia ao (BE) e o pico mais intenso à transição (e, C).

Como a quantidade de carbono incorporada na direção [311]B é muito maior em relação às demais orientações, o pico de PL associado à transição elétron-carbono é muito intenso e mesmo para altas intensidades de excitação e temperaturas, a transição (e, C) predomina sobre a transição banda a banda. Por este motivo, não observamos diretamente a presença de um pico associado à emissão B-B.

5.3. Conclusões parciais

Em resumo, observamos os seguintes comportamentos das transições ópticas envolvendo o arseneto de gálio e arseneto de gálio-alumínio volumétricos:

- As energias das recombinações excitônicas no GaAs são invariantes em relação à orientação do substrato.
- As concentrações de alumínio nas barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ variam entre as diferentes orientações, devido ao crescimento simultâneo.
- A incorporação de carbono na amostra com orientação [311]B é muito maior em relação às demais orientações, em função dos pares de ligações pendentes na superfície.
- O pico relacionado à transição envolvendo o carbono na amostra crescida na direção [311]A tem uma intensidade muito menor em relação a [100] e [311]B, o que torna esta superfície ideal para elaboração de heteroestruturas que necessitam de uma baixa incorporação de carbono e alta qualidade nas interfaces.

CAPÍTULO 6 – RESULTADOS E DISCUSSÃO: POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS

Neste capítulo apresentamos os resultados experimentais e as discussões do comportamento das transições excitônicas observadas nos poços quânticos múltiplos em função da orientação do substrato. Os estudos são feitos em função da intensidade de excitação e temperatura em duas situações distintas: na primeira utilizamos baixas intensidades de excitação para investigar os efeitos das flutuações de potencial (*blueshift* do pico de fotoluminescência em baixas temperaturas) e, na segunda, observamos a variação do *gap* de energia com a temperatura utilizando intensidades de excitação altas o suficiente para blindar as flutuações de potencial.

6.1. Espectros de PL dos MQWs a 12 K

Na Figura 6.1 apresentamos os resultados de fotoluminescência das ligas volumétricas GaAs e AlGaAs e dos poços quânticos múltiplos em função da orientação do substrato. Os resultados dos materiais *bulk* já foram discutidos no capítulo anterior.

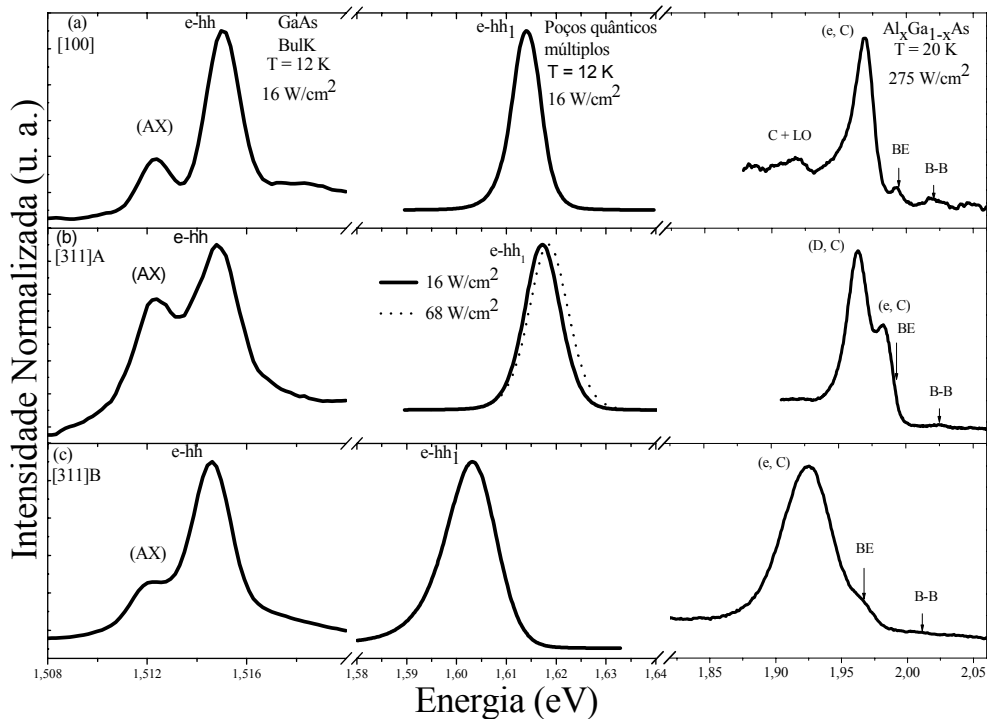


Figura 6.1. Espectros de PL do GaAs *bulk*, poços quânticos múltiplos e AlGaAs volumétrico. A intensidade de excitação utilizada para os MQWs é de 16 W/cm^2 . Nos poços crescidos na orientação [311]A a intensidade de excitação máxima é de 68 W/cm^2 . Estes são os valores das intensidades de excitação necessárias para saturar as flutuações de potencial.

No centro da Figura 6.1 são mostrados os espectros relacionados às transições excitônicas entre o primeiro nível de elétron (E_n) e o primeiro nível de buraco pesado (E_{hh1}) dos poços quânticos múltiplos. Os máximos dos picos estão em 1613,1 meV, 1617,3 meV e 1603,3 meV com largura de linha a meia altura (FWHM) de 6,3, 8,4 e 11,8 meV para as direções [100], [311]A e [311]B respectivamente. Devido ao crescimento simultâneo as espessuras dos poços quânticos são diferentes ^[6.1, 6.2], com um menor valor para os poços crescidos ao longo da direção [311]B (Tabela 6.1). Assim, espera-se que o pico de PL desta amostra se desloque para maiores energias em relação às demais, uma vez que uma menor largura do poço implica em um aumento da energia dos níveis de energia de elétrons e buracos. Porém, observa-se que este pico de PL tem um menor valor de energia em relação ao pico de fotoluminescência dos poços crescidos na direção [100] (maior espessura). Isto pode estar associado a outros mecanismos que intervêm, provocando variações nas energias das transições excitônicas, devido às diferentes orientações, como a formação de campos piezoelétricos, a anisotropia das massas efetivas ^[6.3 - 6.5] e a rugosidade nas interfaces devido à densidade de degraus das superfícies (311)A/B ^[6.6 - 6.9].

Tabela 6.1. Resultados obtidos por difração de raios-X da concentração de alumínio (%Al), largura dos poços (L_w) e barreiras (L_B) dos sistemas $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ crescidos nas diferentes orientações cristalográficas.

Orientação	% Al	L_w (Å)	L_B (Å)
[100]	36 ± 1	55 ± 2	285 ± 11
[311]A	33 ± 1	52 ± 1	256 ± 5
[311]B	34 ± 1	47 ± 1	275 ± 6

6.2. Resultados experimentais para baixas intensidades de excitação

Os efeitos das flutuações de potencial sobre a variação do *gap* de energia com a temperatura (*blueshift* no pico de PL) são analisados no intervalo de temperatura de 12 K a 120 K, para quatro diferentes intensidades de excitação: 0,016, 0,160, 1,600 e 16,00 W/cm². O aumento na intensidade de excitação leva à redução gradual do *blueshift* do pico da PL, com a blindagem completa das flutuações de potencial para a intensidade de 16,00 W/cm², exceto para os poços crescidos na orientação [311]A. Nesta amostra é necessária uma intensidade de 68,00 W/cm². As variações de temperatura para estas intensidades são feitas da seguinte forma: de 12 a

30 K a variação de temperatura é realizada de 3 em 3 K, de 30 a 50 K de 5 em 5 K e de 50 a 120 K de 10 em 10 K. No total, obtemos 17 pontos experimentais, o que garante a alta densidade de pontos necessária para um bom ajuste.

Na Figura 6.2 mostramos os espectros de PL dos MQWs no intervalo de temperatura de 12 a 120 K para todas as amostras com intensidade de excitação de $0,160 \text{ W/cm}^2$. Observa-se um *blueshift* do pico de PL à medida que aumenta a temperatura, na região de baixas temperaturas, em todas as amostras. Este é um gráfico característico, e observa-se que as posições dos máximos dos picos de fotoluminescência, para as demais intensidades de excitação, também apresentam um *blueshift* em baixas temperaturas. Nas intensidades de excitação mais elevadas, as flutuações de potencial são blindadas.

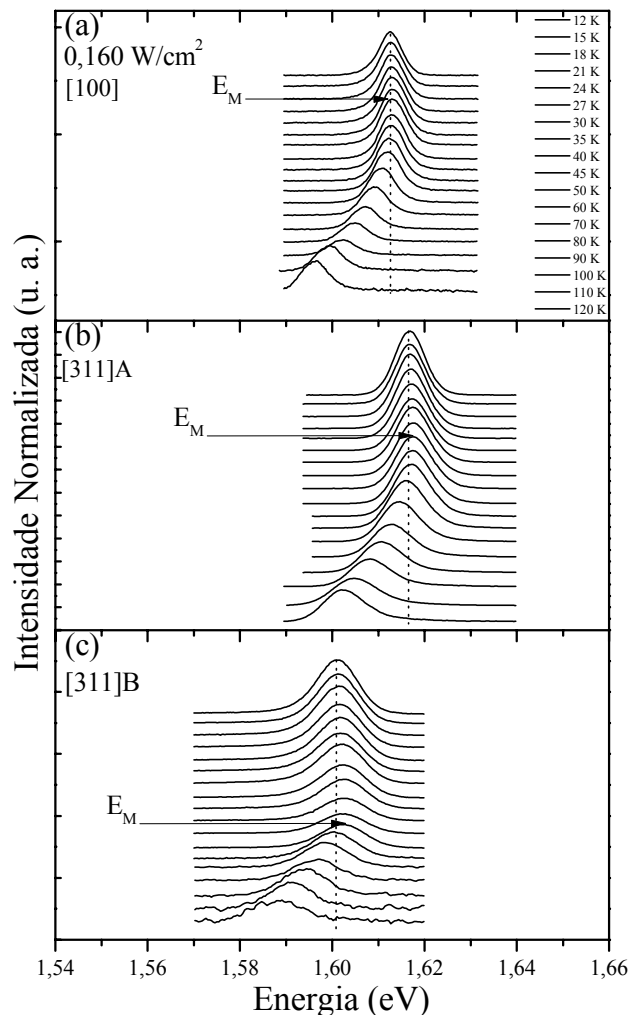


Figura 6.2. Espectros de PL dos MQWs com intensidade de excitação de $0,160 \text{ W/cm}^2$, para as orientações (a) [100], (b) [311]A e (c) [311]B. A baixas temperaturas o pico de PL sofre um *blueshift* até atingir o valor máximo E_M , a partir do qual experimenta o *redshift* devido a ETR e IEF.

Em baixas temperaturas, a energia da transição excitônica aumenta com a temperatura até um valor máximo (E_M) a partir do qual passa a diminuir (*redshift*). A temperatura (T_M) correspondente a E_M é a temperatura em que se observa o início do *redshift*. O valor de T_M é de aproximadamente 30, 40 e 60 K para as respectivas direções [100], [311]A e [311]B.

Na Figura 6.3 mostramos a variação da energia de transição excitônica em função da temperatura de todas as amostras no intervalo de 12 a 120 K, para todas as intensidades de excitação. Nos *insets* apresentamos as curvas até 60 K para melhor visualização do comportamento dos pontos experimentais a baixas temperaturas.

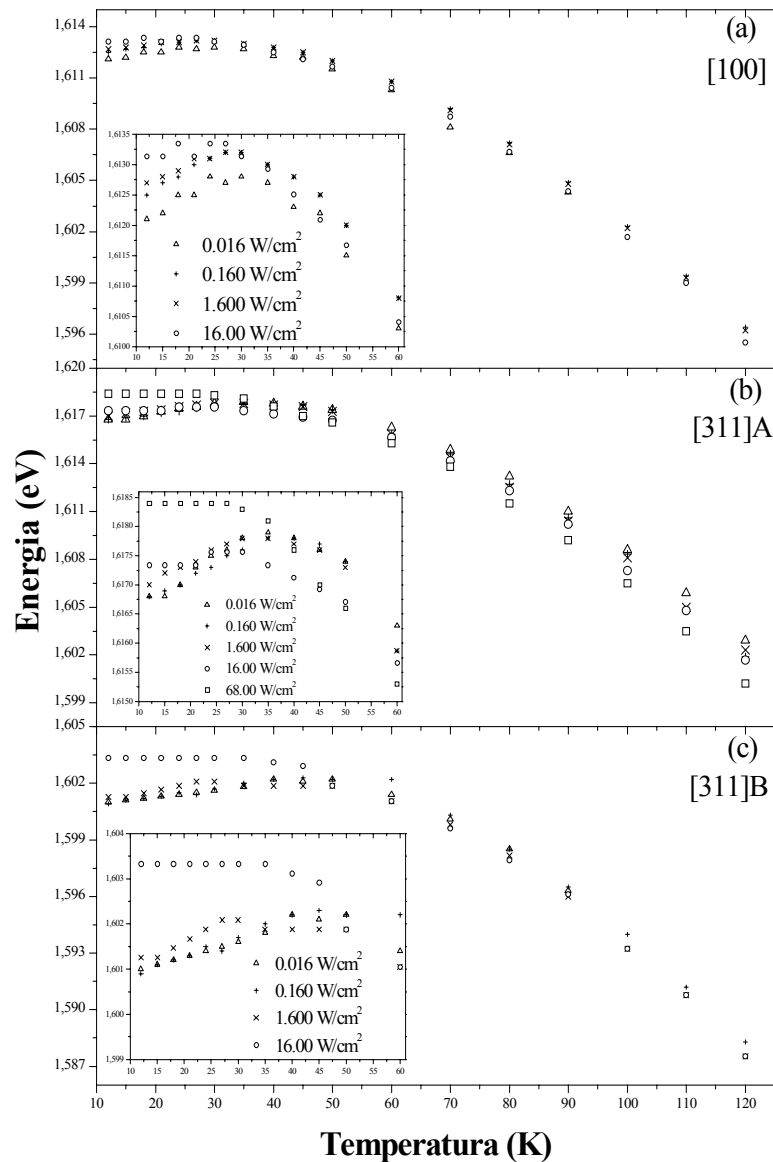


Figura 6.3. Comportamento da energia de transição excitônica em função da temperatura, mostrando a redução gradual do *blueshift* a baixas temperaturas com o aumento da intensidade de excitação.

Observa-se que o *blueshift* diminui e o valor de E_M desvia para menores energias quando há o aumento da intensidade de excitação no intervalo de temperatura analisado. Uma vez que a densidade de estados é finita, quando a intensidade de excitação aumenta ocorre um progressivo preenchimento dos estados de menor energia no *band-tail*. Este efeito é responsável pela redução gradual do *blueshift* observado. Para intensidades de excitação suficientemente altas, as transições associadas ao *band-tail* saturam e a recombinação de éxcitons livres torna-se mais eficiente.

6.3. Resultados experimentais para altas intensidades de excitação

Na Figura 6.4 mostramos espectros de fotoluminescência dos MQWs no intervalo de temperatura de 12 a 300 K para todas as orientações.

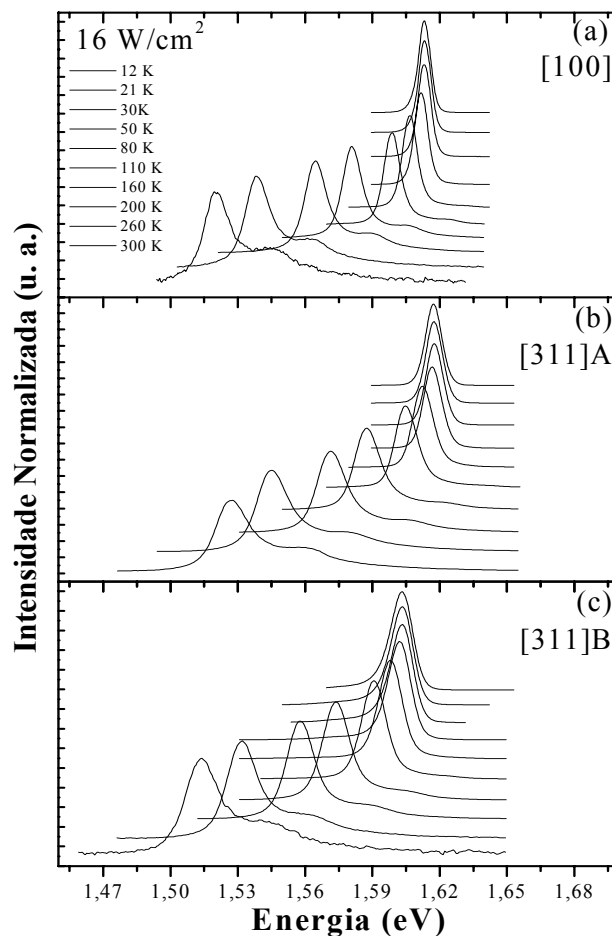


Figure 6.4. Espectros de fotoluminescência dos MQWs crescidos nas direções [100], [311]A e [311]B. Os picos mais intensos são associados à transição excitônica entre o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco pesado.

Os picos mais intensos são associados à transição excitônica entre o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco pesado ($E_1 - E_{hh1}$). Em torno de 80 K no lado de maior energia dos picos, observa-se a presença de um ombro cuja intensidade cresce com o aumento da temperatura para todas as amostras. Este pico está associado provavelmente à transição excitônica envolvendo o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco leve ($E_1 - E_{lh1}$).

A variação de temperatura é feita da seguinte maneira: de 12 a 30 K a variação de temperatura é realizada de 3 em 3 K, de 30 a 50 K de 5 em 5 K, de 50 a 120 K de 10 em 10 K, e de 120 a 300 K de 20 em 20 K. Na Figura 6.5 mostramos o comportamento dos pontos experimentais da transição excitônica ($E_1 - E_{hh1}$) no intervalo de temperatura de 12 a 300 K, com intensidade de excitação de 16 W/cm^2 para todas as amostras.

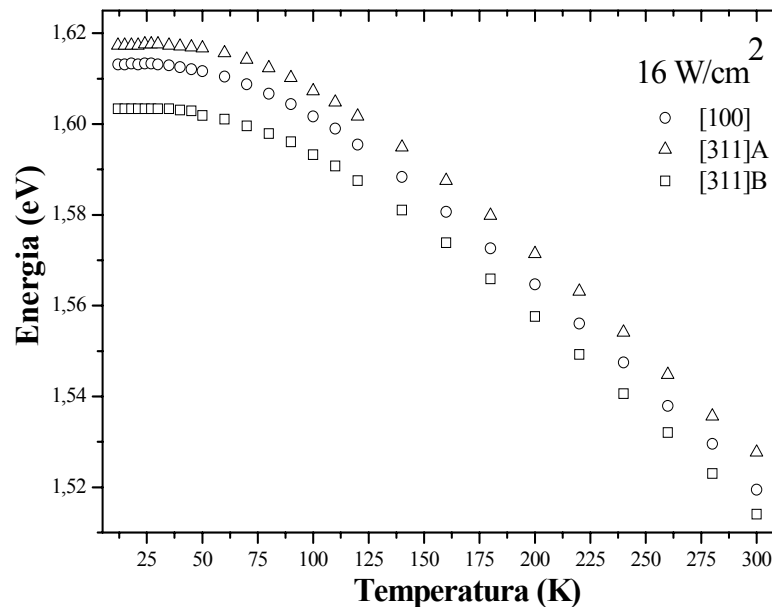


Figura 6.5. Variação da energia de transição excitônica com a temperatura relacionada ao primeiro nível de elétron e primeiro nível de buraco pesado, para a intensidade de excitação de 16 W/cm^2 .

Como observado previamente, as flutuações de potencial são blindadas com a intensidade de excitação de 16 W/cm^2 nos poços crescidos nas orientações [100] e [311]B. Nos poços crescidos na direção [311]A é necessária uma intensidade de 68 W/cm^2 para ocorrer a blindagem completa das flutuações. Porém, para a intensidade de 16 W/cm^2 empregada nesta última amostra, mesmo apresentando um pequeno *blueshift* a baixas temperaturas, é possível realizar os ajustes pelas equações apresentadas no capítulo 4 sem considerar a presença de flutuações de potencial. Os valores encontrados dos parâmetros de ajustes de todos os modelos utilizando

intensidade de 68 W/cm^2 são os mesmos, dentro do erro experimental, daqueles encontrados para a intensidade de excitação de 16 W/cm^2 . Assim, as intensidades de excitação são mantidas em 16 W/cm^2 para todas as amostras, a fim de realizar um estudo sistemático e comparativo dos parâmetros de ajuste dos diferentes modelos.

6.4. Discussão dos resultados experimentais para baixas intensidades de excitação

Em baixas temperaturas e para baixas intensidades de excitação, os portadores fotoexcitados estão sob a influência das flutuações de potencial. Com a fotoexcitação, os portadores podem relaxar através da interação com fônons para os mínimos do potencial de confinamento antes de ocorrer a recombinação radiativa. Assim, em baixas temperaturas os portadores são termalizados para os mínimos da densidade de estados excitônica. Com o aumento da temperatura, os portadores são excitados termicamente para maiores energias provocando um *blueshift* na posição do pico de luminescência até determinada temperatura, a partir da qual ocorre o *redshift* causado pela redução do *gap* de energia devida à interação elétron-fônon e expansão térmica da rede [6.10 - 6.12].

Em geral, para baixas temperaturas e baixas intensidades de excitação, as recombinações radiativas são dominadas por éxcitons localizados. Estas recombinações, que ocorrem a partir do *band-tail*, são deslocadas para menores energias em relação à energia de recombinação de éxcitons delocalizados, e o espectro de PL é assimétrico com uma cauda aparentemente exponencial no lado de menor energia, como pode ser observado na Figura 6.1 e 6.2. Esta assimetria tem sido usada como a assinatura das recombinações de éxcitons localizados nas desordens microscópicas do material semiconductor [6.13, 6.14].

Singh e Bajaj desenvolveram um modelo correlacionando flutuações na composição química da liga de AlGaAs e rugosidades das interfaces com a largura de linha excitônica em poços quânticos simples [6.15]. Neste modelo, a largura de linha aumenta com a concentração de Al devido à penetração da função de onda na região da barreira. Lourenço *et al.* [6.16] mostraram recentemente que tanto a FWHM quanto o valor de E_M são sistematicamente reforçados com o aumento da concentração de alumínio na barreira, indicando que flutuações na composição da liga da barreira possuem forte contribuição sobre a localização de éxcitons em QWs.

Embora os MQWs crescidos na direção [100] possuam maior concentração de alumínio em relação às demais amostras (Tabela 6.1), é conhecido que poços quânticos crescidos nas direções [311]A e [311]B têm uma rugosidade natural das interfaces maior do que à [100] [6.8, 6.17, 6.18]. A Figura 6.6 mostra uma imagem de microscopia de força atômica (AFM) em camadas múltiplas de GaAs (311)A, evidenciando as corrugações naturais desta superfície [6.19].

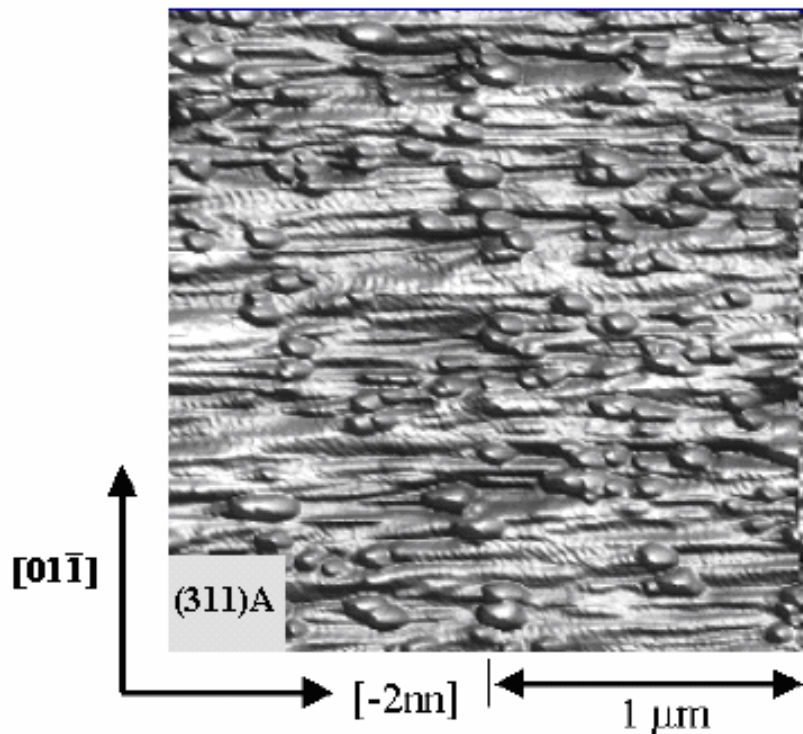


Figura 6.6. Imagem de AFM de camadas múltiplas de GaAs (311)A. As corrugações naturais são vistas no plano perpendicular a superfície $[01\bar{1}]$. Ilhas são formadas no topo das corrugações [6.19].

Em poços quânticos simples crescidos na orientação [100], desordens nas interfaces e na composição química das ligas provocam flutuações no perfil de potencial, e é conhecido que os efeitos das flutuações sobre a energia de emissão radiativa são mais pronunciáveis em poços quânticos com menores larguras [6.20]. Em poços quânticos múltiplos, o número de interfaces é um fator a mais, em relação a poços simples, que contribui para gerar flutuações de potencial. Além disso, amostras crescidas sobre as superfícies (311) exibem corrugações naturais oriundas do próprio substrato com esta orientação, o que é um fator extra em relação à superfície (100) que gera flutuações de potencial. Todos estes fatores combinados explicam o maior *blueshift* e um maior valor de E_M para os poços crescidos nas direções [311]A/B comparados à [100] (Fig 6.2). Por outro lado, os valores das FWHM dos espectros das amostras (311) são maiores em relação à

(100) (Fig 6.1), corroborando a hipótese de maiores amplitudes das flutuações interfaciais das amostras com orientações (311). Um comparativo semelhante pode ser feito entre as amostras com orientações [311]A e [311]B. Neste caso, observa-se que a amostra crescida na direção [311]B possui maior flutuação de potencial que a amostra crescida na direção [311]A.

Na Figura 6.3 havíamos apresentado o comportamento da energia de transição excitônica com a temperatura, para diferentes intensidades de excitação. Observamos que em todas as amostras ocorreu uma diminuição gradual do *blueshift* com o aumento da intensidade de excitação. As flutuações de potencial foram saturadas em 16 W/cm² nos poços crescidos nas orientações [100] e [311]B, e em 68 W/cm² para os poços crescidos na direção [311]A. Este efeito é associado à densidade de estados eletrônica na amostra [311]A ser três vezes maior em relação a [311]B [6.21]. Na amostra crescida na direção [311]B, um comportamento particular foi observado. A partir da menor intensidade de excitação, mesmo aumentando duas ordens de grandeza, a energia de transição excitônica em função da temperatura manteve-se constante, devido às maiores flutuações de potencial presentes nesta amostra.

6.4.1. Ajustes das curvas de $E_g \times T$ com *blueshift* em baixas temperaturas

Na Figura 6.7 mostramos os ajustes dos pontos experimentais (curvas sólidas) que descrevem as transições excitônicas em função da temperatura (Fig. 6.3) realizados pela equação 6.1, proposta por Eliseev *et al.* [6.22] e demonstrada no capítulo 3:

$$E_{PL}(T) = \left\{ E_g(0) - \frac{\alpha\Theta}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta}\right)^p} - 1 \right] - \frac{\sigma_E^2}{k_B T} \right\} \quad (6.1)$$

Para melhor visualização, mostramos apenas os ajustes feitos para os pontos experimentais com a menor e maior intensidade de excitação. O ponto T_X é a temperatura onde as curvas de ajustes para as menores e maiores intensidades de excitação se interceptam.

O termo σ_E está associado a flutuações de potencial oriundas das seguintes desordens: composicionais da liga; número de interfaces em poços quânticos múltiplos; flutuações nas espessuras dos 20 poços quânticos e, para as amostras com orientação [311], as corrugações naturais dos substratos com essa orientação.

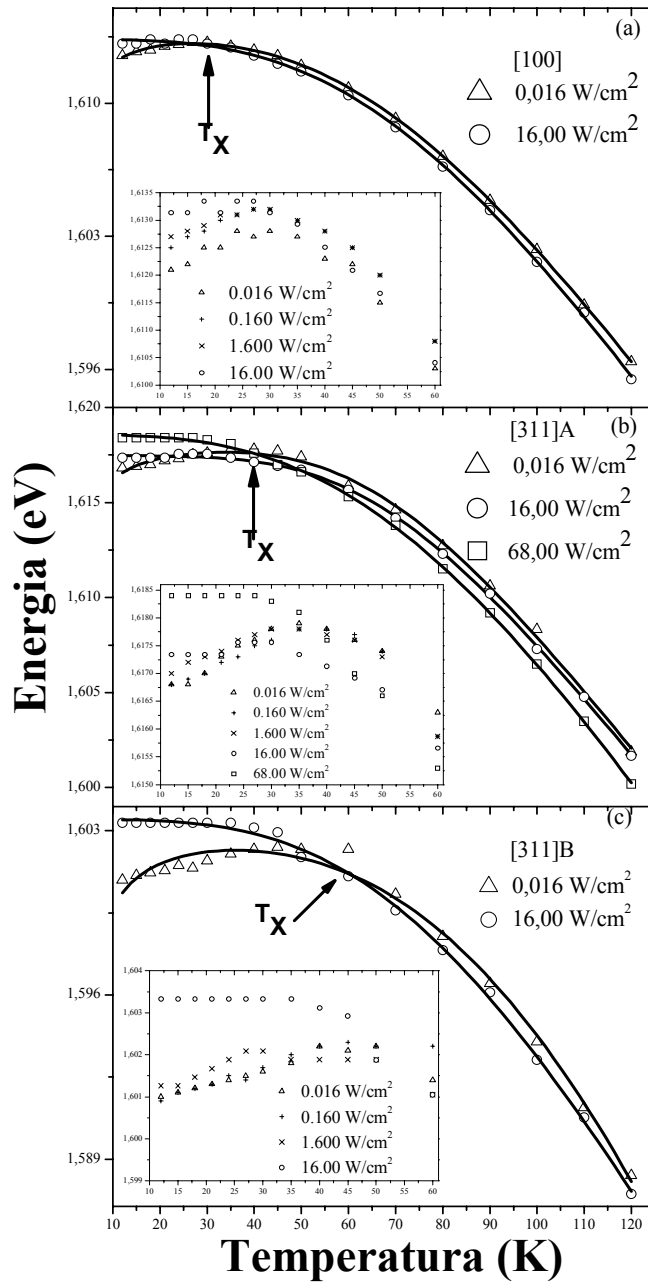


Figure 6.7. Variação da energia de transição excitônica em função da temperatura. As linhas sólidas são as curvas do modelo de ajuste de Pässler-p subtraído do termo que considera a presença de flutuações de potencial. Nos insets são mostrados em detalhe as evoluções dos pontos experimentais com o aumento da intensidade de excitação.

Na Tabela 6.2 são mostrados os valores experimentais da energia do pico de PL a 12 K em função da intensidade de excitação, e os valores de σ_E obtidos dos ajustes para todas as orientações. O valor deste parâmetro diminui com o aumento da intensidade de excitação, para todas as amostras, até se anular para a maior intensidade.

Tabela 6.2. Valores de σ_E obtidos pelo modelo de Pässler-p subtraído os efeitos das flutuações de potencial. Os valores contidos na coluna E_{PL} são os valores experimentais da energia do pico de PL tomados a 12 K. Para efeito de comparação são mostrados, na última coluna, os valores de σ_E obtidos para poços quânticos simples^[6.16].

Orientação	Int. Exc. (W/cm ²)	E_{PL} (meV)	σ_E (meV)	σ_E ^[6.16] (meV)
[100]	0,016	1612,1	1,46 ± 0,12	0,93 ± 0,05 0,61 ± 0,05
	0,160	1612,5	1,34 ± 0,01	
	1,600	1612,7	1,23 ± 0,04	
	16,00	1613,1	0	
[311]A	0,016	1616,8	1,47 ± 0,01	
	0,160	1616,8	1,40 ± 0,03	
	1,600	1617,0	1,29 ± 0,01	
	16,00	1617,3	0,43 ± 0,01	
	68,00	1618,4	0	
[311]B	0,016	1601,0	1,72 ± 0,02	
	0,160	1601,0	1,81 ± 0,02	
	1,600	1601,3	1,51 ± 0,01	
	16,00	1603,3	0	

Lourenço *et al.*^[6.16] estudaram poço quântico simples de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As crescido na direção [100], com largura nominal de 60 Å. Eles obtiveram os valores de $\sigma_E = 0,93$ meV e 0,61 meV para as intensidades de excitação de 0,160 e 1,600 W/cm². Observa-se que os valores de σ_E obtidos para os MQWs são significativamente maiores que os obtidos para os poços simples (Tabela 6.2). Esta diferença pode ser explicada pelo fato de que em poços quânticos múltiplos, além das desordens morfológicas na composição química da liga e das interfaces presentes em poços simples, há uma maior contribuição das desordens interfaciais pelo aumento do número de interfaces e flutuações nas espessuras dos poços, em comparação aos poços quânticos simples. Os poços quânticos crescidos na orientação [311]B e [311]A apresentam os maiores valores de σ_E , em razão da maior corrugação natural destas superfícies^[6.8, 6.17, 6.18], da menor largura dos poços e da maior incorporação de impurezas na orientação [311]B.

Quando materiais semicondutores estão sob altas intensidades de excitação, uma grande quantidade de portadores são fotoexcitados para as bandas de condução e valência. Nesta situação os portadores podem interagir, provocando o que é conhecido como efeito de muitos corpos. Como resultado, surge o fenômeno de renormalização do *gap* de energia, o que pode causar alterações significativas no espectro de emissão^[6.23 - 6.27]. Evidências experimentais deste efeito foram observadas em materiais volumétricos e heteroestruturas semicondutoras com altos

níveis de dopagem^[6.24, 6.25] ou sob fortes intensidades de excitação^[6.26, 6.27]. Como característica principal, a renormalização do *gap* de energia leva a um *redshift* na energia do pico de PL.

No regime de baixas intensidades de excitação e baixas temperaturas, os portadores de carga estão sujeitos a flutuações no perfil de potencial. À medida que se aumenta a potência de excitação, os efeitos causados pelas flutuações diminuem devido ao preenchimento dos estados de menores energias. Por outro lado, o aumento da intensidade de excitação também pode provocar uma renormalização do *gap* de energia devido aos efeitos de muitos corpos. Duarte *et al.*^[6.28] argumentam que em intensidades de excitação intermediárias existe uma competição entre as flutuações de potencial e os efeitos de renormalização do *gap* de energia sobre a energia da recombinação radiativa dos portadores. Tal competição faz com que as curvas da E_{PL} versus T obtidas para diferentes intensidades de excitação apresentem um cruzamento em uma temperatura característica T_X . A temperatura T_X é interpretada como o ponto para a qual os mecanismos de renormalização do *gap* de energia e as flutuações de potencial são equivalentes no processo de emissão radiativa dos portadores.

As curvas de ajustes dos pontos experimentais com menor e maior intensidade de excitação se cruzam nas temperaturas características $T_X = 26, 40$ e 61 K para as direções [100], [311]A e [311]B respectivamente, como pode ser observado na Figura 6.7. Abaixo de T_X , as flutuações de potencial dominam as transições excitônicas e para valores maiores que T_X os efeitos da renormalização do *gap* de energia passam a predominar^[6.28]. Assim, nota-se que nas superfícies (311) o ponto onde ocorre o cruzamento é maior em relação à (100), mostrando que as flutuações de potencial, de fato, são mais profundas nestas orientações.

6.5. Ajustes dos pontos experimentais para altas intensidades de excitação

Na Figura 6.8 mostramos os pontos experimentais da transição excitônica ($E_1 - E_{hh1}$) em função da temperatura. As curvas sólidas e pontilhadas apresentadas são os resultados dos ajustes realizados pelos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ . Nos *insets* são mostrados os pontos experimentais e as curvas de ajustes até 60 K para melhor visualização dos comportamentos dos ajustes a baixas temperaturas. Nota-se que a baixas temperaturas as curvas de ajustes do modelo de Varshni passam acima dos pontos experimentais, a curva do modelo de

Viña passa abaixo e as curvas dos modelos de Pässler apresentam os melhores ajustes em relação aos demais modelos.

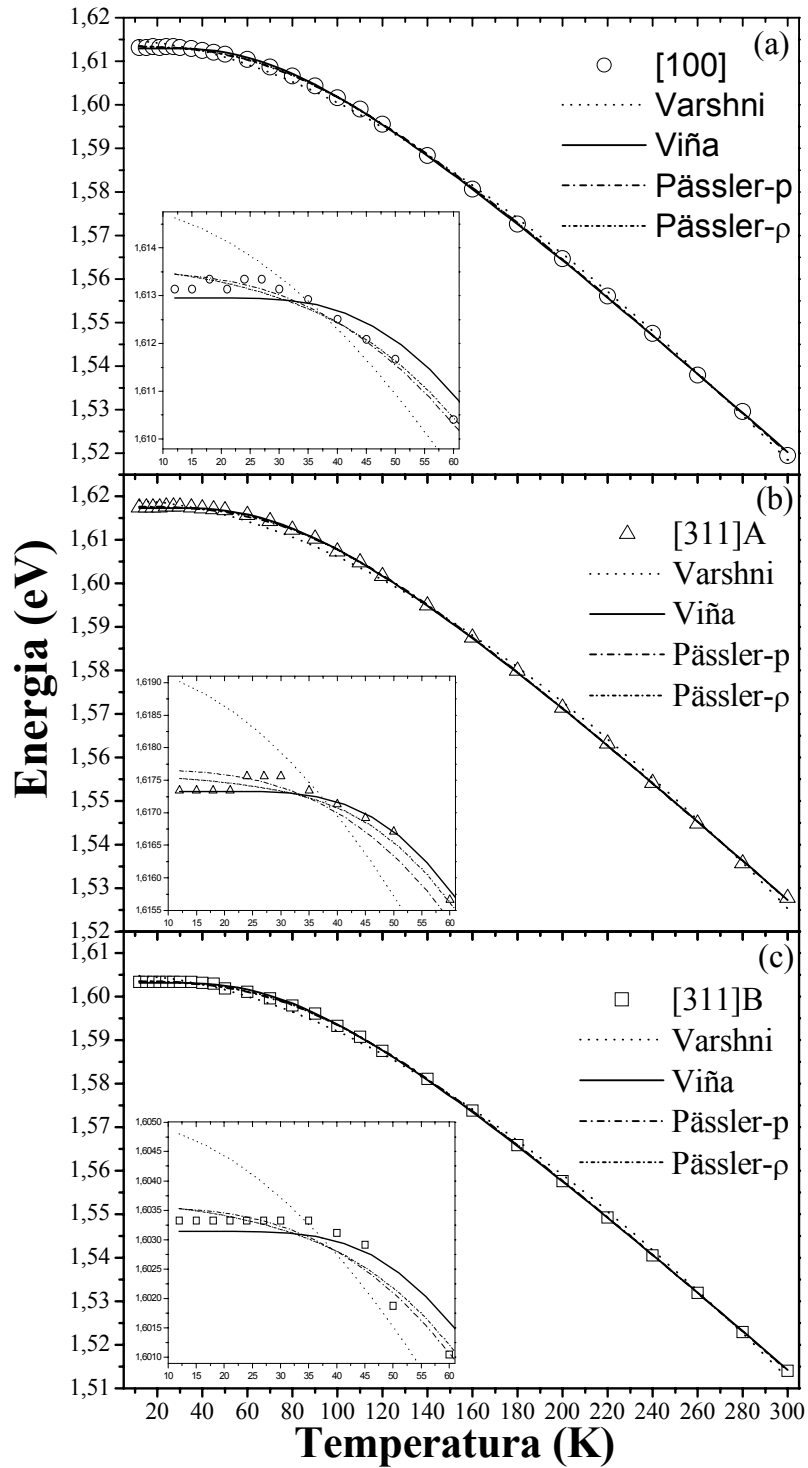


Figure 6.8. Ajustes da variação da energia de transição excitônica no intervalo de temperatura de 12 a 300 K. Os ajustes são feitos pelos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler-ρ. Nos *insets* são mostrados em mais detalhes os comportamentos das curvas de ajustes a baixas temperaturas.

As equações que descrevem os modelos utilizados nos ajustes são mostradas abaixo:

$$\text{Varshni} \quad E_g(T) = E_{gV}(0) - \alpha_{var} \frac{T^2}{\beta + T} \quad (6.2)$$

$$\text{Viña} \quad E_g(T) = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B / T) - 1} \right] \quad (6.3)$$

$$\text{Pässler-}\rho \quad E_g(T) = E_{g\rho}(0) - \frac{\alpha_\rho \Theta_\rho}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta_\rho} \right)^p} - 1 \right] \quad (6.4)$$

$$\text{Pässler-}\rho \quad E_g(T) = E_{g\rho}(0) - \frac{\alpha_\rho \Theta_\rho}{2} \left[\frac{\rho}{2} \left(\sqrt[4]{1 + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^2 + \left(\frac{4T}{\Theta_\rho} \right)^4} - 1 \right) + (1 - \rho) \left(\coth \left(\frac{\Theta_\rho}{2T} \right) - 1 \right) \right] \quad (6.5)$$

No modelo de Varshni ^[6.29], $E_{gV}(0)$ é o *gap* de energia a 0 K e α_{var} e β são coeficientes empíricos a serem obtidos através dos ajustes dos dados experimentais.

No modelo semi-empírico de Viña ^[6.10], $E_g(T = 0) = E_B - a_B$ é o *gap* de energia a 0 K, a_B descreve a intensidade da interação elétron-fônon óptico e $\Theta_B = \hbar\omega/k_B$ representa a energia média dos fônons na escala de temperatura.

No modelo de Pässler do *tipo-}\rho* ^[6, 11, 6.30 - 6.35], $E_{gp}(0)$ é o *gap* de energia a 0 K, α_ρ é um parâmetro associado à entropia do *gap* de energia em regiões de altas temperaturas, Θ_ρ é um parâmetro empírico associado à energia efetiva dos fônons na escala de temperatura. A energia efetiva dos fônons $\Theta \equiv \langle \varepsilon \rangle / k_B$ é dada por $\Theta \equiv \Theta_\rho [1,152 + 0,145 \ln(p - 1,7)]$ ^[6.31]. p é um parâmetro empírico relacionado à forma da função espectral elétron-fônon. Para o modelo de Pässler- p o grau de dispersão dos fônons é dado por $\Delta = 1/\sqrt{p^2 - 1}$.

No modelo de Pässler- ρ ^[6, 11, 6.30 - 6.35], $E_{gp}(0)$ é o *gap* de energia a 0 K, $0 \leq \rho \leq 1$ controla os pesos relativos da contribuição dos fônons acústicos e ópticos, o termo $\Theta_\rho \equiv \hbar\omega_0/k_B$ representa a energia de corte na escala de temperatura. A relação de dispersão para este modelo é

definida por $\Delta = \frac{1}{(2-\rho)} \sqrt{\frac{\rho}{3}(4-3\rho)}$ e o parâmetro análogo à temperatura efetiva dos fônons é dado por $\Theta_r = \langle \varepsilon \rangle / k_B = \Theta_\rho (1 - 0,5\rho)$ [6.34].

Nas Tabelas 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6 apresentamos os valores dos parâmetros de ajustes das energias de transição excitônica em função da temperatura (Fig. 6.8) obtidos pelos quatro modelos citados na página anterior para todas as amostras.

Tabela 6.3. Parâmetros de ajustes obtidos pelo modelo de Varshni. Na coluna E_g (exp) são mostrados os valores experimentais do *gap* de energia a 12 K, enquanto que na coluna E_g os dados apresentados referem-se aos valores obtidos dos ajustes.

Orientação	E_g (exp) (meV)	$E_{gv}(0)$ (meV)	α (meV/K)	β (K)	S^2 (meV) ²
[100]	1613,1	1614,9 ± 0,32	0,84 ± 0,07	485,4 ± 64	1,0E-3
[311]A	1617,3	1619,2 ± 0,38	1,02 ± 0,15	676,4 ± 137	1,5E-3
[311]B	1603,3	1605,0 ± 0,35	0,98 ± 0,13	655,3 ± 119	1,2E-3

Tabela 6.4. Parâmetros de ajustes obtidos pelo modelo de Viña.

Orientação	$E_g(0) = E_B - a_B$ (meV)	E_B (meV)	a_B (meV)	Θ_B (meV)	S^2 (meV) ²
[100]	1613,0	1671,2 ± 1,04	58,2 ± 1,1	21,0 ± 0,2	1,4E-4
[311]A	1617,3	1682,1 ± 0,87	64,8 ± 0,9	23,1 ± 0,2	7,5E-5
[311]B	1603,1	1666,3 ± 0,95	63,2 ± 0,9	22,9 ± 0,2	9,2E-5

Tabela 6.5. Parâmetros de ajustes obtidos pelo modelo de Pässler-p.

Orientação	$E_{gp}(0)$ (meV)	α_p (meV/K)	Θ_p (meV)	Θ (meV)	p	Δ	S^2 (meV) ²
[100]	1613,5 ± 0,1	0,47 ± 5,1E-3	18,5 ± 0,5	21,7	2,86 ± 0,08	0,37	6,4E-5
[311]A	1617,7 ± 0,1	0,46 ± 5,4E-3	18,6 ± 0,5	22,5	3,18 ± 0,09	0,33	8,4E-5
[311]B	1603,5 ± 0,1	0,46 ± 3,6E-3	19,1 ± 0,3	22,8	3,04 ± 0,06	0,35	3,2E-5

Tabela 6.6. Parâmetros de ajustes obtidos pelo modelo de Pässler-ρ.

Orientação	$E_{gp}(0)$ (meV)	α_ρ (meV/K)	Θ_r (meV)	ρ	Δ	S^2 (meV) ²
[100]	1613,6 ± 0,1	0,49 ± 3,5E-3	22,2 ± 0,8	0,238 ± 0,038	0,29 ± 0,11	5,9E-8
[311]A	1617,6 ± 0,1	0,49 ± 3,5E-3	23,5 ± 0,7	0,085 ± 0,036	0,17 ± 0,10	6,4E-8
[311]B	1603,6 ± 0,1	0,49 ± 2,9E-3	23,9 ± 0,6	0,174 ± 0,028	0,25 ± 0,09	3,7E-8

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

$$S^2 = \left(\frac{1}{n - m} \right) \sum_{i=1}^n (E_{gi}^{exp} - E_{gi}^{ajust})^2 \quad (6.6)$$

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 experimentais com m parâmetros variáveis na função de ajuste ^[6.36].

6.5.1. Discussão dos resultados obtidos pelos modelos de ajustes para altas intensidades de excitação

No modelo de Varshni os valores do *gap* de energia obtidos dos ajustes são maiores em relação aos dados obtidos experimentalmente à temperatura de 12 K. Os parâmetros α e β para os poços crescidos nas orientações [311]A e [311]B são maiores do que os dos poços crescidos na direção [100] e, como discutido no capítulo 3, esses parâmetros não apresentam significado físico preciso. Além disso, os valores da variância (S^2) são relativamente elevados em relação aos dos demais modelos, mostrando que os parâmetros de ajustes obtidos pelo modelo de Varshni do *gap* de energia em função da temperatura, para os poços crescidos em todas as orientações não são satisfatórios.

Os valores do *gap* de energia a 0 K, obtidos pelos modelos de Viña, Pässler-p e ρ , estão em boa concordância com os valores tomados experimentalmente a 12 K. As causas que levam às diferenças nos *gaps* de energias entre as diferentes orientações já foram apresentadas no item 6.1.

Os valores das intensidades da interação elétron-fônon (a_B) no modelo de Viña (Tab. 6.4) são os mesmos, dentro do erro experimental, para os poços crescidos nas orientações [311]A e [311]B, e ligeiramente menor, em torno de 5 meV, para os poços crescidos na orientação [100].

Os parâmetros Θ_B , Θ e Θ_r nos respectivos modelos de Viña, Pässler-p e Pässler- ρ , representam a energia média dos fônons. Como pode ser observado nas tabelas 6.4, 6.5 e 6.6, esses valores são os mesmos (~ 22 meV), dentro do erro experimental, para os poços crescidos

nas diferentes orientações, mostrando que a orientação do substrato, a princípio, não influencia na energia efetiva dos fônons nos poços quânticos múltiplos. Dentre os diversos mecanismos responsáveis pela dependência do *gap* de energia com a temperatura em materiais semicondutores, o principal é a interação elétron-fônon. Através dos resultados obtidos de $E_g(T)$ nos poços quânticos crescidos nas diferentes orientações, notamos que as interações elétron-fônon que induzem o decréscimo do *gap* com a temperatura são associadas essencialmente aos fônons acústicos longitudinais (LA) ^[6.37, 6.38] (ver espectros de fônons no capítulo 2).

Os ajustes dos pontos experimentais pelos modelos de Pässler (Tabelas 6.5 e 6.6), mostraram que α_p e α_ρ são os mesmos para as três orientações. Esses parâmetros descrevem a inclinação da curva de $E_g(T)$ para altas temperaturas. O fato de estes valores serem similares mostra que a interação elétron-fônon é aproximadamente a mesma nos poços quânticos com as diferentes orientações ^[6.41].

Os valores encontrados das dispersões dos fônons (Δ) são aproximadamente os mesmos dentro do erro experimental entre os modelos de Pässler-p (Tab. 6.5) e Pässler- ρ (Tab. 6.6). De acordo com os valores encontrados dos ajustes, os fônons encontram-se no regime de dispersão intermediário ($0,30 < \Delta < 0,57$) para os poços quânticos crescidos em todas as orientações. Os resultados do ajuste de mínimo-quadrado (S^2) para estes dois modelos mostraram valores da ordem de três ordens de grandeza menores para o modelo do tipo ρ do que para o tipo p , indicando que os ajustes realizados pelo modelo de Pässler- ρ são mais precisos do que por Pässler-p.

Os valores de p e ρ encontrados nos modelos de Pässler - p e - ρ mostraram pequenas variações com a orientação do substrato, e estão de acordo com os encontrados, para poços quânticos simples crescidos na direção convencional [100] ^[6.42].

6.6. Conclusões parciais

Em resumo, observamos os seguintes comportamentos das transições excitônicas nos poços quânticos múltiplos em função da orientação do substrato:

- As posições dos picos de PL relacionadas às transições excitônicas, $E_1 - E_{hh1}$ estão deslocadas entre si, devido às diferenças nos parâmetros estruturais dos poços (largura dos poços e barreiras e concentração de alumínio) e efeitos oriundos da orientação dos substratos, como a formação de campos piezoelétricos, anisotropia das massas efetivas e rugosidades das interfaces.
- A energia do pico de fotoluminescência em função da temperatura, para baixas intensidades de excitação, apresenta um *blueshift* até uma determinada temperatura para todas as amostras, indicando a presença de flutuações de potencial.
- Os MQWs crescidos nas direções [311]A/B possuem maiores flutuações de potencial em relação aos poços quânticos múltiplos crescidos na direção [100], indicando um maior grau das corrugações superficiais dos MQWs crescidos nas direções [311].
- Os poços quânticos múltiplos crescidos na direção [100] apresentam maiores flutuações de potencial quando comparados a poços quânticos simples, devido ao aumento no número de interfaces e flutuações nas espessuras dos MQWs.
- As curvas de $E_{PL}(T)$ obtidas para diferentes intensidades de excitação cruzam em uma temperatura característica T_X , cujo valor é de 26 K, 40 K e 61 K para as direções [100], [311]A e [311]B, respectivamente. Este é o ponto onde os mecanismos que dão origem ao *blueshift* (oriundo das flutuações de potencial) e o *redshift* (devido à renormalização do *gap* de energia) se equiparam.
- A intensidade de excitação utilizada para blindar as flutuações de potencial nos poços crescidos na orientação [311]A é maior que a utilizada nos poços crescidos na direção [311]B. Tal comportamento é explicado pelo fato da densidade de estados eletrônica na direção [311]A ser três vezes maior em relação a [311]B.
- O comportamento do *gap* de energia no intervalo de temperatura de 12 a 300 K mostra uma variação aproximadamente linear para temperaturas superiores a 150 K para todas as orientações. Além disso, as retas mostraram-se aparentemente paralelas entre si, o que é um indício de que a interação elétron-fônon óptico é a mesma para as três orientações.
- Os parâmetros de ajustes dos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ mostram que: a

curvatura de $E_g(T)$ no limite de altas temperaturas, a intensidade da interação elétron-fônon e a energia média dos fônons são aproximadamente as mesmas, dentro do erro experimental, para todas as amostras.

- A análise da variância (S^2) mostra que os melhores ajustes são obtidos empregando o modelo de Pässler- ρ , seguido pelos modelos de Pässler- p , Viña e Varshni.

CAPÍTULO 7 – CONCLUSÃO

Nesta dissertação de mestrado estudamos a influência da orientação do substrato de GaAs nas transições excitônicas de poços quânticos múltiplos de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crescidos por MBE. Os parâmetros estruturais dos poços foram determinados por difração de raios-X e as transições radiativas investigadas pela técnica de fotoluminescência em função da temperatura e intensidade de excitação. No regime de baixas intensidades de excitação, investigamos os efeitos das flutuações do potencial de confinamento sobre a variação das transições excitônicas com a temperatura. Analisamos também o comportamento do *gap* de energia com a temperatura utilizando intensidades de excitação altas o suficiente para blindar os efeitos das flutuações de potencial. Os pontos experimentais foram ajustados pelos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ , e os parâmetros obtidos dos ajustes avaliados em função da orientação do substrato. As principais conclusões deste trabalho foram:

Materiais *bulk*:

- As energias das recombinações excitônicas no GaAs são invariantes em relação à orientação do substrato.
- As concentrações de alumínio nas barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ variam entre as diferentes orientações, devido ao crescimento simultâneo.
- A incorporação de carbono na amostra com orientação [311]B é muito maior em relação às demais orientações, em função dos pares de ligações pendentes na superfície.
- O pico relacionado à transição envolvendo o carbono na amostra crescida na direção [311]A tem uma intensidade muito menor do que nas direções [100] e [311]B, o que torna esta superfície ideal para elaboração de heteroestruturas que necessitam de uma baixa incorporação de carbono e alta qualidade nas interfaces.

Poços quânticos múltiplos:

- As posições dos picos de PL relacionadas às transições excitônicas, $E_1 - E_{hh1}$ estão deslocadas entre si, devido às diferenças nos parâmetros estruturais dos poços e efeitos oriundos da orientação dos substratos.
- A energia do pico de fotoluminescência em função da temperatura, para baixas intensidades de excitação, apresenta um *blueshift* até uma determinada temperatura para todas as amostras, indicando a presença de flutuações de potencial.

- Os MQWs crescidos nas direções [311]A/B possuem maiores flutuações de potencial do que os poços quânticos múltiplos crescidos na direção [100], indicando um maior grau das corrugações superficiais dos MQWs crescidos nas direções [311].
- Os poços quânticos múltiplos crescidos na direção [100] apresentam maiores flutuações de potencial quando comparados a poços quânticos simples, devido ao aumento no número de interfaces e flutuações nas espessuras dos MQWs.
- As curvas de $E_{PL}(T)$ obtidas para diferentes intensidades de excitação cruzam em uma temperatura característica T_X , cujo valor é de 26 K, 40 K e 61 K para as direções [100], [311]A e [311]B, respectivamente. Este é o ponto onde os mecanismos que dão origem ao *blueshift* (oriundo das flutuações de potencial) e ao *redshift* (devido à renormalização do *gap* de energia) se equiparam.
- A intensidade de excitação utilizada para blindar as flutuações de potencial nos poços crescidos na orientação [311]A é maior que a utilizada nos poços crescidos na direção [311]B. Tal comportamento é explicado pelo fato da densidade de estados eletrônica na direção [311]A ser três vezes maior do que na direção [311]B.
- O comportamento do *gap* de energia no intervalo de temperatura de 12 a 300 K mostra uma variação aproximadamente linear para temperaturas superiores a 150 K para todas as orientações. Além disso, as retas mostraram-se aparentemente paralelas entre si, o que é um indicio de que a interação elétron-fônon óptico é a mesma para as três orientações.
- Os parâmetros de ajustes dos modelos de Varshni, Viña, Pässler-p e Pässler- ρ , mostram que a curvatura de $E_g(T)$ no limite de altas temperaturas, a intensidade da interação elétron-fônon e a energia média dos fônons são aproximadamente as mesmas, dentro do erro experimental, para todas as amostras.
- A análise da variância (S^2) mostra que os melhores ajustes são obtidos empregando o modelo de Pässler- ρ , seguido pelos modelos de Pässler-p, Viña e Varshni.

Sugerimos abaixo, futuros trabalhos que podem ser desenvolvidos a partir dos conhecimentos adquiridos nesta dissertação:

- Estudar o comportamento da transição excitônica entre o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco leve, verificando qual a diferença em energia entre os picos associados às transições excitônicas associadas a buracos pesados e leves, relacionando os resultados com as

massas efetivas dos portadores.

- Realizar o crescimento individual de poços quânticos simples em diversas direções de crescimento, com *gap* direto, mantendo os parâmetros estruturais dos poços (concentração de alumínio, largura do poço e barreira) iguais pra todas as orientações. Como discutido ao longo do trabalho, o crescimento simultâneo leva a variações nestes parâmetros estruturais.
- Estudar a influência da orientação do substrato em poços quânticos simples com *gap* indireto ($0,45 < x < 1,0$).
- Realizar um estudo da variação da energia de ligação excitônica com a concentração de alumínio em poços quânticos com diferentes orientações cristalográficas.
- Calcular teoricamente, com base nos resultados experimentais, os níveis de energias dos poços quânticos nas diferentes orientações cristalográficas.
- Estender o estudo dos itens anteriores a super-redes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Referências do capítulo 1.

- [1.1] Pensando o Futuro. O desenvolvimento da física e sua inserção na vida social e econômica do país. Ed. Sociedade Brasileira de Física (2005).
- [1.2] M. A. Herman, H. Sitter. “Molecular Beam Epitaxy”, Springer-Verlag, Berlin, p. 314 (1989).
- [1.3] D. A. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiehmann, T. H. Wood, C. A. Burrus, Phys. Rev. Lett. **53**, 2173 (1984).
- [1.4] E. C. Valadares, L. A. Cury, M. Henini, Ciência Hoje **18** (106), 40 (1995).
- [1.5] Y. P. Varshni, Physica (Utrecht) **34**, 194(1967).
- [1.6] L. Viña, S. Logothetidis and M. Cardona, Phys. Rev. B **30**, 1979 (1984).
- [1.7] R. Pässler, Phys. Status Solid. B **200**, 155 (1997).
- [1.8] R. Pässler, J. Appl. Phys. **83**, 3356 (1998).
- [1.9] R. Pässler, Phys. Stat. Sol.(b) **193**, 135 (1996).
- [1.10] R. Pässler, Solid State Electronics **39**, 1311 (1996).
- [1.11] R. Pässler, G. Oelgart, J. Appl. Phys. **82**, 2611 (1997).
- [1.12] R. Pässler, J. Appl. Phys. **88**, 2570 (2000).
- [1.13] R. Pässler, Phys. Rev. B **66**, 085201 (2002).
- [1.14] E. C. Ferreira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, J. A. P. da Costa, E. L. Albuquerque, P. W. Mauriz and G. A. Farias, Surf. Sci. **532**, 774 (2003).
- [1.15] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, L. C. Poças, D. O. Toghinho Filho and J. R. Leite, Braz. J. Phys. **34**, 517 (2004).
- [1.16] A. Bell, S. Srinivasan, C. Plumlee, H. Omiya, F. A. Ponce, J. Christen, S. Tanaka, A. Fujioka and Y. Nakagawa, J. Appl. Phys. **95**, 4670 (2004)
- [1.17] P. G. Elissev, P. Perlin, J. Lee and M. Osinski, Appl. Phys. Lett. **71**, 569 (1997).
- [1.18] Q. Li, S. J. Xu, M. H. Xie and S. Y. Tong, J. Phys. Condens. Matter **17**, 4853 (2005).
- [1.19] Q. Li, S. J. Xu, W. C. Cheng, M. H. Xie, S. Y. Tong, C. M. Che, H. Yang, Appl. Phys. Lett. **79**, 1810 (2001).
- [1.20] V. I. Litvinov, Appl. Phys. Lett. **77**, 2210, (2000).

- [1.21] S. A. Lourenço, M. A. T. da Silva, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, A. A. Quivy, and T. E. Lamas, *J. Appl. Phys.*, **101**, 113536 (2007).
- [1.22] R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard, *Phys. Rev. B*, **29**, 7085 (1984).
- [1.23] N. Harima, J. T. Nelson, T. Ohachi, *J. Cryst. Growth*, **237**, 274 (2002).
- [1.24] B. E. Cole, W. Batty, Y. Imanaka, Y. Shimamoto, J. Singleton, J. M. Chamberlain, N. Miura, M. Henini and T. Cheng, *J. Phys. Cond. Matt.* **7**, 675 (1995).
- [1.25] I. W. Tao, C. Schwartz, W. I. Wang, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 838 (1992).
- [1.26] H. Li, T. Mei, D. H. Zhang, W. J. Fan, S. F. Yoon and W. K. Loke, *J. Cryst. Growth* **288**, 36 (2006).
- [1.27] A. Sanz-Hervás, S. Cho, and A. Majerfeld and B. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3073, (2000).
- [1.28] R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard, *Phys. Rev. B*, **29**, 7085 (1984).
- [1.29] N. Harima, J. T. Nelson, T. Ohachi, *J. Cryst. Growth*, **237**, 274 (2002).
- [1.30] B. E. Cole, W. Batty, Y. Imanaka, Y. Shimamoto, J. Singleton, J. M. Chamberlain, N. Miura, M. Henini and T. Cheng, *J. Phys. Cond. Matt.* **7**, 675 (1995).
- [1.31] E. Ribeiro, F. Cerdeira and A. Cantarero, *Phys. Rev. B* **51**, 7890, (1995).
- [1.32] O. Brandt, K. Kanamoto, Y. Tokuda, N. Tsukada, O. Wada and J. Tanimura, *Phys. Rev. B* **48**, 17599 (1993).
- [1.33] S. L. S. Freire, L. A. Cury, F. M. Matinaga, E. C. Valadares, M. V. B. Moreira, A. G. de Oliveira, A. R. Alves, J. M. C. Vilela, M. S. Andrade, T. M. Lima and J. A. Sluss, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14**, 3555 (1996).
- [1.34] T. E. Lamas, A. A. Quivy, C. S. Sergio, G. M. Gusev, J. C. Portal, *J. Appl. Phys.* **97**, 076107 (2005).
- [1.35] T. Fukunaga, T. Takamori and H. Nakashima, *J. Cryst. Growth* **81**, 85 (1987).
- [1.36] B. Gil, Y. El. Khalifi, H. Mathieu, C. de Paris, J. Massies, G. Neu, T. Fukunaga and H. Nakashima, *Phys. Rev. B* **41**, 2885 (1990).
- [1.37] M. S. Kim, Y. Kim, M. S. Lee, Y. J. Park, S. I. Kim, S. K. Min, *J. Cryst. Growth*, **146**, 482 (1995).
- [1.38] X. Li, D. Sun, J. Dong, J. Li, M. Kong, S. F. Yoon, *J. Appl. Phys.* **83**, 7900 (1998).
- [1.39] R. Goldhahn, S. Shokhovets, G. Gobsch, V. Nakov, M. Henini, G. Hill, *Superl. and Microstr.* **17**, 401 (1995).

- [1.40] R. Nötzel, N. N. Ledentov, L. Däweritz, M. Hohenstein and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3812 (1991).
- [1.41] Z. M. Wang, V. R. Yazdanpanah, J. L. Shultz and G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2965 (2002).
- [1.42] W. I. Wang, E. E. Mendez, T. S. Kuan and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 826 (1985).
- [1.43] W. Q. Li, P. K. Bhattacharya, S. H. Kwok and R. Merlin, *J. Appl. Phys.* **72**, 3129 (1992).
- [1.44] R. Nötzel, N. N. Ledentsov, L. Däweritz and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3129 (1991).
- [1.45] R. Nötzel, J. Temmyo and T. Tamamura, *Nature (London)* **369**, 131 (1994).
- [1.46] S. Lan, K. Akahane, H. Z. Song, Y. Okada and M. Kawabe, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17**, 1105 (1999).
- [1.47] X. Li, D. Sun, J. Dong, J. Li, M. Kong and S. F. Yoon, *J. Appl. Phys.* **83**, 7900 (1998).

Referências do capítulo 2.

- [2.1] J. B. Russel, *Química Geral*, ed. Makron Books, 2ª edição, volume 1 e 2, São Paulo, 1994.
- [2.2] S. Subbana, H. Kroemer, J. L. Merz, *J. Appl. Phys.* **62**, 3766 (1987).
- [2.3] W. T. Wang, R. F. Marks, L. Viña, *J. Appl. Phys.* **59**, 937 (1986).
- [2.4] J. S. Blakemore, *J. Appl. Phys.* **53**, R123 (1982).
- [2.5] <http://phycomp.technion.ac.il/~sshaharr/nonbravais.html>.
- [2.6] J. C. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* **42**, 317 (1970).
- [2.7] S. R. Elliott, *The physics and chemistry of solids*. New York: John Wiley & Sons (2000).
- [2.8] C. Lárez and C. Rincón, *J. Phys. Chem. Solids* **58**, 1111 (1997).
- [2.9] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **200**, 155 (1997).
- [2.10] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 9174 (1987).
- [2.11] E. Molinari, S. Baroni, P. Giannozzi, and S. de Gironcoli, *Phys. Rev. B* **45**, 4280 (1992).
- [2.12] K. Kim and W. G. Spitzer, *J. Appl. Phys.* **50**, 4362 (1979).
- [2.13] Z. C. Feng, S. Perkowitz, D. K. Kinell, R. L. Whitney, and D. N. Talwar, *Phys. Rev. B* **47**, 13466 (1993).
- [2.14] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 5683 (1982).
- [2.15] D. S. Chuu and Y. C. Lou, *Phys. Rev. B* **43**, 14504 (1991).

- [2.16] J. H. Davies, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors – an introduction*, ed. Cambridge University Press, New York (1998).
- [2.17] L. C. Andreani and A. Pasquarello, *Phys. Rev. B* **42**, 8928 (1990).
- [2.18] J. Sing. “Physics of semiconductors and their heterostructures”. Edited by A.T.Brown, McGraw Hill. p. 167 (1993).
- [2.19] J. Groener, R. Carle, G. Landa, C. Guerret-Piécourt, C. Fontaine, and M. Gendry, *Phys. Rev. B* **58**, 10452 (1998).
- [2.20] J. A. Kash, S. S. Jha, and J. C. Tsang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1869 (1987).
- [2.21] S. W. da Silva, Y. A. Pusep, J. C. Galzerani, M. A. Pimenta, D. I. Lubyshev, P. P. González-Borrero, P. Bamaji, *Phys. Rev. B*, **53**, 1927 (1996).
- [2.22] M. Takahashi, P. Vaccaro, K. Fujita and T. Watanabe, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 93 (1995).
- [2.23] Y. A. Pusep, S. W. da Silva, J. C. Galzerani, D. I. Lubyshev, P. P. González-Borrero, E. Marega. Jr., E. Petitprez, N. La Scala Jr., P. Basmaji, *Phys. Stat. Sol. A*, **164**, 455 (1997).
- [2.24] W. I. Wang, E. E. Mendez, T. S. Kuan, L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 826 (1985).
- [2.25] P. N. Uppal, J. S. Ahearn, D. P. Musser, *J. Appl. Phys.* **62**, 3766 (1987).
- [2.26] L. Pavesi, M. Henini, D. Johnston and I. Harrison, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 49 (1995).
- [2.27] S. Tibeku Kassa, R. Hey and K. H. Ploog, *J. Appl. Phys.* **93**, 2638 (2003).
- [2.28] W. Q. Li, P. K. Bhattacharya, S. H. Kwok and R. Merlin, *J. Appl. Phys.* **72**, 3129 (1992).
- [2.29] S. S. Bose, B. Lee, M. H. Kim and G. E. Stillman, *J. Appl. Phys.* **63**, 743 (1988).
- [2.30] M. Henini, N. Galbiati, E. Grilli, M. Guzzi and L. Pavesi, *J. Cryst. Growth* **175**, 1108 (1997).
- [2.31] I. Harrison, L. Pavesi, M. Henini and D. Johnston, *J. Appl. Phys.* **75**, 3151 (1994).
- [2.32] N. Galbiati, E. Grilli, M. Guzzi, P. Albertini, L. Brusaferrri, L. Pavesi, M. Henini and A. Gaparotto, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 555 (1997).
- [2.33] N. Galbiati, E. Grilli, M. Guzzi, L. Brusaferrri, L. Pavesi and M. Henini, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1830 (1996).
- [2.34] R. Nötzel, L. Däweritz and K. Ploog, *Phys. Rev. B* **46**, 4736 (1992).
- [2.35] Tese de doutorado: *Growth and characterization of (In,Ga)As quantum structures controlled by high index GaAs substrate*. Shahram Seyedmohammadi, *University of Arkansas*, (2005).
- [2.36] H. C. Gatos and M. C. Lavine, *J. Electrochem. Soc.* **107**, (1960).

- [2.37] J. R. Arthur, J. Appl. Phys. 39, 4032 (1968).
- [2.38] Z. M. Wang, L. Daweritz, P. Schutzendube, and K. H. Ploog, Phys. Rev. B **61**, R2440 (2000).
- [2.39] Z. M. Wang, J. L. Shultz, and G. J. Salamo, Appl. Phys. Lett. **83**, 1749 (2003).
- [2.40] L. Esaki, R. Tsu. IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [2.41] M. Fox, Optical Properties of solids, Oxford master series in condensed matter physics, New York (2001).
- [2.42] A. Fracaro, H. Iwamoto, Comunicação Interna – Universidade Estadual de Londrina (2005).
- [2.43] 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).
- [2.44] H. C. Lee, K. W. Sun, and C. P. Lee, J. Appl. Phys. **92**, 268 (2002).
- [2.45] D. S. Chuu and Y. C. Lou, Phys. Rev. B **43**, 14504 (1991).
- [2.46] K. Huang and B. Zhu, Phys. Rev. B, **38**, 13377 (1988).
- [2.47] L. C. Andreani and A. Pasquarello, Phys. Rev. B **42**, 8928 (1990).
- [2.48] F. Zhang, Z. Hu, C. Xi, Mat. Sci. and Eng. B, **27**, 7 (1994).
- [2.49] G. Duggan, H. I. Ralph and K. Moore, Phys. Rev. B, **32**, 8395 (1985).
- [2.50] D. C. Rogers and R. J. Nicholas, J. Phys C, **18**, 891 (1985).
- [2.51] D. Arnold, A. Ketterson, T. Henderson, J. Klem and H. Morkoc, J. Appl. Phys., **57**, 2280 (1985).
- [2.52] G. Wang, P. Tronc, R. Melliti, E. Mao, A. Majerfeld, A. Sanz-Hervas, J. Depeyrot, B. W. Kim, Phys. Stat. Sol. A – Appl. Res., **164**, 117 (1997).
- [2.53] R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard, Phys. Rev. B, **29**, 7085 (1984).
- [2.54] J. B. Xia, Phys. Review B, **43**, 9856 (1991).
- [2.55] J. Los, A. Fasolino and A. Catellani, Phys. Rev. B, **53**, 4630 (1996).
- [2.56] Y. El Khalifi, B. Gil, H. Mathieu, T. Fukunaga and H. Nakashima, Phys. Rev. B, **39**, 13533 (1989).
- [2.57] N. Harima, J. T. Nelson and T. Ohachi, J. Cryst. Growth **237**, 274 (2002).
- [2.58] C. Soohaeng, A. Sanz-Hervas, A. Majerfeld and B. W. Kim, Phys. Rev. B, **68**, 035308 (2003).

- [2.59] B. E. Cole, W. Batty, Y. Imanaka, Y. Shimamoto, J. Singleton, J. M. Chamberlain, N. Miura, M. Henini and T. Cheng, *J. Phys. Condens. Matter* **7** 675 (1995).
- [2.60] M. P. Houn, Y. C. Chang and W. I. Wang, *J. Appl. Phys.* **64**, 4609 (1988).
- [2.61] T. N. Morgam, *Phys. Rev.* **139**, A343 (1965).
- [2.62] M. Ichimura, K. Higuchi, Y. Hattori, T. Wada, and N. Nitamura, *J. Appl. Phys.* **68**, 6153 (1990).
- [2.63] D. Ouadjaout and Y. Marfaing, *Phys Rev. B* **46**, 7908 (1992).
- [2.64] H. F. Hess, E. Betzig, T. D. Harris, L. N. Pfeiffer e K. W. West, *Science* **264**, 1740 (1994).
- [2.65] Q. Li, S. J. Xu, M. H. Xie and S. Y. Tong, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, 4853 (2005).
- [2.66] A. Aït-Ouali, J. L. Brebner, R. Y. F. Yip and R. A. Masut, *J. Appl. Phys.* **86**, 6803 (1999).
- [2.67] E. M. Lopes, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, L. C. Poças, E. Laureto and J. C. Harmand, *J. Phys.: Condens. Matter.* **19**, 086207 (2007).
- [2.68] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Bohm, G. Trankle, e G.; Weimann, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 3320 (1994).
- [2.69] D. Gammon, E. S. Snow, e D. S. Katze, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2391 (1995).
- [2.70] H. F. Hess, E. Betzig, T. D. Harris, L. N. Pfeiffer e K. W. West, *Science* **264**, 1740 (1994).
- [2.71] U. Jahn, S. H. Kwok, M. Ramsteiner, R. Hey, H. T. Grahn, e E.; Runge, *Phys. Rev. B* **54**, 2733 (1996).
- [2.72] M. Ramsteiner, R. Hey, R. Klann, U. Jahn, I. Gorbunova, e K. H. Ploog, *Phys. Rev. B* **55**, 5239 (1997).
- [2.73] C. Delalande, M. H. Meynadier, e M. Voos, *Phys. Rev. B* **31**, 2497 (1985).
- [2.74] M. Gurioli, A. Vinattieri, J. Martinez-Pastor, e M. Colocci, *Phys. Rev. B* **50**, 11817 (1994).
- [2.75] A. Polimeni, A. Patané, M. G. Alessi, M. Capizzi, F. Martelli, A. Basacchi, e S. Franchi, *Phys. Rev. B* **54**, 16389 (1996).
- [2.76] E. Runge, e R. Zimmermann, *Adv. Solid. State, Phys.* **38**, 251 (1998); *Phys. Status Solidi A* **164**, 511 (1997).
- [2.77] 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).
- [2.78] Reynolds *Appl. Phys. Lett.* **46**, 51 (1985); Bertl J. *Appl. Phys.* **64**, 6562 (1988); Srinivas, *Phys. Rev. B* **46**, 10193 (1992).

- [2.79] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, D. O. Toginho Filho, E. A. Meneses and J. R. Leite, *Eur. Phys. J. B* **2**, 11 (2001).
- [2.80] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, H. Iwamoto, E. A. Meneses and J. R. Leite, *Superl. Micr.* **29**, 225 (2001).
- [2.81] J. Singh and K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **57**, 5433 (1985).

Referências do capítulo 3.

- [3.1] L. Viña, S. Logothetidis and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **30**, 1979 (1984).
- [3.2] R. Pässler, *Phys. Status Solid. B* **200**, 155 (1997).
- [3.3] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, L. C. Poças, D. O. Toginho Filho and J. R. Leite, *Braz. J. Phys.* **34**, 517 (2004).
- [3.4] A. Manoogian and J. C. Wolley, *Can. J. Phys.* **62**, 285 (1984).
- [3.5] J. P. Walter, R. R. L. Zucca, M. L. Cohen, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 102 (1970).
- [3.6] Z. Hang, D. Yan, F. H. Pollak, G. D. Pettit, and J. M. Woodall, *Phys. Rev. B* **44**, 10546 (1991).
- [3.7] R. Pässler, *Phys. Status. Solidi. B* **200**, 155 (1997).
- [3.8] P. B. Allen and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **23**, 1495 (1981).
- [3.9] E. Antoncik, *Czech. J. Phys.* **5**, 449 (1955).
- [3.10] C. S. Guenzar, A. Bienestock, *Phys. Rev. B* **48**, 4655 (1973),
- [3.11] P. B. Allen and V. Heine, *J. Phys. C: Solid State* **9**, 2305 (1976).
- [3.12] H. Y. Fan, *Phys. Rev.* **82**, 900 (1951).
- [3.13] Y. P. Varshni, *Physica (Utrecht)* **34**, 194(1967).
- [3.14] A. Manoogian, and A. Leclerc, *Phys. Status solidi B*, **92**, K23 (1979).
- [3.15] A. Manoogian and Leclerc. *Phys. Status Solid B*, **92**, K23 (1979); V. Alex, S. Finkbeiner, and J. Weber, *J. Appl. Phys.* **79**, 6943 (1996).
- [3.16] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 9174 (1987).
- [3.17] P. Lautenschlager, M. Garriga, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **36**, 4813 (1987).
- [3.18] C. Lárez and C. Rincón, *J. Phys. Chem. Solids*, **58**, 1111 (1997).
- [3.19] Z. Hang, D. Yan, and Fred H. Pollak, *Phys. Rev. B* **44**, 10546 (1991).

- [3.20] F. G. Sánchez-Almazan, H. Navarro-Contreras, G. Ramírez-Flores, and M. A. Vidal, *J. Appl. Phys.* **79**, 7713 (1996).
- [3.21] L. Malikova, Y. S. Huang, F. H. Pollak, Z. C. Feng, M. Schuman, and R. A. Stall, *Solid State Commun.* **103**, 273 (1997).
- [3.22] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, and Y. M. Kappor, *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [3.23] J. Filipowicz, C. Ghezzi, and L. Tarricone, *Solid State Communications* **74**, 533 (1990).
- [3.24] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, P. W. Smith, A. C. Gossard, W. Wiegmann, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-20**, 265 (1984).
- [3.25] D. Bimberg, J. Christen, A. Steckenborn, G. Weimann, and W. Schlapp, *Journal of Lumin.* **30**, 562 (1985).
- [3.26] 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).
- [3.27] Y. G. Zhao, R. A. Masut, J. L. Brebner, C. A. Tran, and J. T. Graham, *J. Appl. Phys.* **76**, 5921 (1994).
- [3.28] E. Grilli, M. Guzzi, R. Zamboni, and L. Pavesi, *Phys. Rev. B* **45**, 1638 (1992).
- [3.29] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol.(b)* **193**, 135 (1996).
- [3.30] R. Pässler, *Solid State Electronics* **39**, 1311 (1996).
- [3.31] R. Pässler, G. Oelgart, *J. Appl. Phys.* **82**, 2611 (1997).
- [3.32] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **88**, 2570 (2000).
- [3.33] R. Pässler, *Phys. Rev. B* **66**, 085201 (2002).
- [3.34] S. Gopalan, P. Lautenschlager, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 5577 (1987).
- [3.35] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [3.36] 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).
- [3.37] D. Toghinho 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).
- [3.38] 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).
- [3.39] E. Laureto, E. A. Meneses, W. Carvalho Jr, A. A. Bernussi, E. Ribeiro, E. C. F. da Silva, and J. B. B. de Oliveira, *Brazilian J. Phys.* **32**, 314 (2002).

- [3.40] R. Zimmerman, J. Cryst. Growth, **101**, 346 (1990).
- [3.41] J. Christen and D. Bimberg, Phys. Rev. B **42**, 7213 (1990).
- [3.42] S. A. Lourenço, M. A. T. da Silva, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, A. A. Quivy and T. E. Lamas, J. Appl. Phys. **101**, 113536 (2007).
- [3.43] P. G. Elissev, P. Perlin, J. Lee and M. Osinski, Appl. Phys. Lett. **71**, 569 (1997).
- [3.44] P. G. Elissev, J. Appl. Phys. **93**, 5404 (2003).

Referências do capítulo 4.

- [4.1] Cho A. Y. and J. R. Prog., Prog. Solid State Chem., **10**, 157, (1975).
- [4.2] Ploog K., em Freyhardt, H. C. (ed.) Crystal, Growth, Properties and Applications. Springer, Berlin, 73, (1980).
- [4.3] I. F. L Dias, R. C. Teixeira, J. L. Duarte, Introdução aos semicondutores e suas aplicações tecnológicas, ed. Eduel, (2005).
- [4.4] J. H. Neave, and B. A. Joyce, J. Cryst. Growth, **44** 357 (1978).
- [4.5] Arthur J. R., J. Appl. Phys., **39**, 4032, (1968).
- [4.6] Cho A. Y., J. Appl. Phys., **41**, 2780, (1970).
- [4.7] Foxon C. T., Joyce B. A. em Kaldis, E. (ed.) Current Physics in Materials Science, North-Holland, Amsterdam, **7**, 1 (1981).
- [4.8] Foxon C. T. and Joyce B. A., Sur. Sci. **50**, 434 (1975).
- [4.9] Foxon C. T. and Joyce B. A., Sur. Sci. **64**, 293 (1977).
- [4.10] <http://www.uark.edu/misc/salamo/>.
- [4.11] M. A. Herman, and H. Sitter in “Molecular Beam Epitaxy”, Springer-Verlag, Berlin, p. 29 and 36 (1989).
- [4.12] J. H. Neove, B. A. Joecy, P. J. Dabson, and N. Norton, Appl. Phys. A **34**, 179 (1984).
- [4.13] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 7th edition, ed. Wiley, 1996.
- [4.14] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>
- [4.15] W. L. Bragg, Proc. Cambridge Phil. Soc. **17**, 43 (1913).
- [4.16] P. F. Fewster, X-ray scattering from semiconductors, 2nd edition, ed. Imperial College Press (2003).

- [4.17] T. H. Gfroerer, Photoluminescence in analysis of surfaces and interfaces, in encyclopedia of analytical chemistry, ed. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2000.
- [4.18] M. Fox, Optical Properties of solids, Oxford master series in condensed matter physics, New York, 2001.
- [4.19] D. D. Sell, Phys. Rev. B **6**, 3750, (1972).
- [4.20] J. I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors, Dover Publications, Inc, New York, 1975.
- [4.21] Roberto Cingoloni, Klaus Ploog. Adv. in Phys. **40**, 558 (1991).
- [4.22] R. Kumar, S. S. Prabhu and A. S. Vengurlekar, Phys. Scripta **56**, 308 (1997)
- [4.23] A. Gopal, R. Kumar and A. S. Vengurlekar, J. Appl. Phys. **87**, 1858 (2000).
- [4.24] M. A. Gilleo, P. T. Bailey and D. E. Hill, Phys. Rev. **174**, 898 (1968).
- [4.25] P. S. Chemla, Phys. Tod. **38**, 35 (1985).
- [4.26] K. K. Bajaj, Mat. Scien. Eng. R, **34**, 59 (2001).
- [4.27] O. Brandt, K. Kanamoto, Y. Tokuda and N. Tsukada, Phys. Rev. B, **48**, 17599 (1993).
- [4.28] K. J. Moore, P. Dawson and C. T. Foxon, Phys. Rev. B **34**, 6022 (1986).
- [4.29] P. Dawson, K. J. Moore, G. Duggan, H. I. Ralph and C. T. B. Foxon, Phys. Rev. B **34**, 6007 (1986).
- [4.30] I. Fukunaga, T. Takamori and H. Nakashima, J. of Cryst. Growth **81**, 85 (1987).
- [4.31] H. Li, T. Mei, D. H. Zhang, W. J. Fan, S. F. Yoon and W. K. Loke, J. of Crys. Growth **288**, 36 (2006).

Referências do capítulo 5.

- [5.1] L. Pavesi, J. Appl. Phys. **75** (10), 4779 (1994).
- [5.2] S. J. Xu, S. J. Chua, X. Zhang, Z. H. Zhang, C. P. Luo, Z. L. Yuan, Z. Y. Xu and J. M. Zhou, IEEE J. Select. Top. in Quant. Electr. **3**, 471 (1997).
- [5.3] M. Mihara, Y. Nomura, M. Mannoh, K. Yamanaka, S. Naritsuka, K. Shinozaki, T. Yuasa and M. Ishii, J. Appl. Phys. **55** (10), 3760 (1983).
- [5.4] M. El Allali, C. B. Sorensen and E. Veje, Phys. Rev. B **48**, 4398 (1993).
- [5.5] N. Galbiati, E. Grilli, M. Guzzi, L. Brusaferrri, L. Pavesi and M. Henini, Semicond. Sci. Technol. **11**, 1830 (1996).

- [5.6] N. Galbiati, E. Grilli, M. Guzzi, P. Albertini, L. Brusaferrri, L. Pavesi, M. Henini and A. Gasparotto, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 555 (1997).
- [5.7] I. W. Tao, C. Schwartz, W. I. Wang, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 838 (1992).
- [5.8] C. Bosio, J. L. Staehli, M. Guzzi, G. Burri and R. A. Logan, *Phys. Rev. B*, **38**, 3263 (1988).

Referências do capítulo 6.

- [6.1] H. Li, T. Mei, D. H. Zhang, W. J. Fan, S. F. Yoon and W. K. Loke, *J. Cryst. Growth* **288**, 36 (2006).
- [6.2] A. Sanz-Hervás, S. Cho, and A. Majerfeld and B. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3073, (2000).
- [6.3] R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard, *Phys. Rev. B*, **29**, 7085 (1984).
- [6.4] N. Harima, J. T. Nelson, T. Ohachi, *J. Cryst. Growth*, **237**, 274 (2002).
- [6.5] B. E. Cole, W. Batty, Y. Imanaka, Y. Shimamoto, J. Singleton, J. M. Chamberlain, N. Miura, M. Henini and T. Cheng, *J. Phys. Cond. Matt.* **7**, 675 (1995).
- [6.6] I. W. Tao, C. Schwartz, W. I. Wang, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 838 (1992).
- [6.7] E. Ribeiro, F. Cerdeira and A. Cantarero, *Phys. Rev. B* **51**, 7890, (1995).
- [6.8] R. Notzel, N. N. Ledentsov, L. Däweritz, M. Hohenstein and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3812 (1991).
- [6.9] I. W. Tao, C. Schwartz, W. I. Wang, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 838 (1992).
- [6.10] L. Viña, S. Logothetidis and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **30**, 1979 (1984).
- [6.11] R. Pässler, *Phys. Status Solid. B* **200**, 155 (1997).
- [6.12] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, L. C. Poças, D. O. Togninho Filho and J. R. Leite, *Braz. J. Phys.* **34**, 517 (2004).
- [6.13] D. Ouadjaout and Y. Marfaing, *Phys Rev. B* **46**, 7908 (1992).
- [6.14] A. Aït-Ouali, J. L. Brebner, R. Y. F. Yip and R. A. Masut, *J. Appl. Phys.* **86**, 6803 (1999).
- [6.15] J. Singh and K. K. Bajaj, *J. Appl. Phys.* **57**, 5433 (1985).
- [6.16] S. A. Lourenço, M. A. T. da Silva, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, A. A. Quivy, and T. E. Lamas, *J. Appl. Phys.* **101**, 113536 (2007).
- [6.17] O. Fukunaga, T. Takamori and H. Nakashima, *J. Crys. Growth* **81**, 85 (1987).

- [6.18] Z. M. Wang, V. R. Yazdanpanah, J. L. Shultz and G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2965 (2002).
- [6.19] Tese de doutorado: *Growth and characterization of (In,Ga)As quantum structures controlled by high index GaAs substrate*. Shahram Seyedmohammadi, *University of Arkansas*, (2005).
- [6.20] E. Laureto, E. A. Meneses, W. Jr Carvalho, A. A. Bernussi, E. Ribeiro, E. C. F. Silva, and J. B. B. Oliveira, *Brazilian J. Phys.* **32**, 314 (2002).
- [6.21] F. Zhang, Z. Hu, C. Xi, *Mat. Scien. and Eng. B* **27**, 7 (1994).
- [6.22] P. G. Elissev, P. Perlin, J. Lee and M. Osinski, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 569 (1997).
- [6.23] R. Cingolani and K. Ploog, *Adv. Phys.* **40**, 535 (1991), and references therein.
- [6.24] Y. J. Wang, S. J. Xu, Q. Li, D. G. Zhao, and H. Jang, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 041903 (2006).
- [6.25] J. D. Ye, S. L. Gu, S. M. Zhu, S. M. Liu, Y. D. Zheng, R. Zhang, and Y. Shi, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 192111 (2005).
- [6.26] T. Nagai, T.J. Inagaki, and Y. Kanemitsu, *Appl. Phys. Lett.* **84** (8), 1284 (2004).
- [6.27] S. Ghosh, *Phys. Rev. B* **62**, 8053 (2000).
- [6.28] J. L. Duarte, L. C. Poças, E. Laureto, I. F. L. Dias, E. M. Lopes, S. A. Lourenço and J. C. Harmand, “Competition between confinement potential fluctuations and bandgap renormalization effects in InGaAs/InGaAlAs single and double quantum wells”, submitted to *Phys. Rev. B*.
- [6.29] Y. P. Varshni, *Physica (Utrecht)* **34**, 194(1967).
- [6.30] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol.(b)* **193**, 135 (1996).
- [6.31] R. Pässler, *Solid State Electronics* **39**, 1311 (1996).
- [6.32] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **88**, 2570 (2000).
- [6.33] R. Pässler, *Phys. Rev. B* **66**, 085201 (2002).
- [6.34] S. Gopalan, P. Lautenschlager, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **35**, 5577 (1987).
- [6.35] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [6.36] P. R. Bevington, *Data Reduction and Error Analysis of the Physical Science*, McGraw – Hill, New York (1968).
- [6.37] E. Molinari, S. Baroni, P. Giannozzi, and S. de Gironcoli, *Phys. Rev. B* **45**, 4280 (1992).
- [6.38] K. Kim and W. G. Spitzer, *J. Appl. Phys.* **50**, 4362 (1979).
- [6.39] L. Pavesi, *J. Appl. Phys.* **75** (10), 4779 (1994).
- [6.40] J. L. T. Waugh and G. Dolling, *Phys. Rev.* **132**, 2410 (1963).

[6.41] S. A. Lourenço, I.F.L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, H. Iwamoto, E. A. Meneses and J. R. Leite, *Superlatt. and Microstruct.* **29** (2), 225 (2001).

[6.42] Dissertação de mestrado: Estudo das transições excitônicas em poços quânticos através da técnica de fotoluminescência, Marco Aurélio Toledo Silva, Universidade Estadual de Londrina, (2006).

ARTIGOS PUBLICADOS, ACEITOS E TRABALHOS APRESENTADOS

Artigo publicado

Temperature-dependence of photoluminescence properties of GaAs/AlAs superlattices grown on different GaAs orientations. **M. D. Teodoro**, E. Laureto, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, E. Marega Jr., P. P. González-Borrero, *Revista Brasileira de Vácuo e Aplicações (RAV)*, **25** (1), 20 (2006).

Artigo aceito para publicação

Substrate orientation effect on potential fluctuations in multiquantum wells of GaAs/AlGaAs, **M. D. Teodoro**, I. F. L. Dias, P. P. González-Borrero, S. A. Lourenço, E. Laureto, J. L. Duarte, I. Mazzaro, E. Marega Jr. and G. J. Salamo, *Journal of Applied Physics*.

Trabalhos apresentados em anais de congresso

M. D. Teodoro, P. P. González-Borrero, V. M. Lenart, E. Laureto, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. M. Lopes, E. Marega Jr., G. J. Salamo. Fotoluminescência de super-redes semicondutoras ultrafinas de (GaAs) m / (AlAs) 5 com $m = 3$ e 5 . In: XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2006, São Lourenço - MG.

M. D. Teodoro, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, P. P. González-Borrero, E. Marega Jr., G. J. Salamo. Potential fluctuations in multiquantum wells of AlGaAs/GaAs with different orientations. In: 13th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, 2007, São Paulo - SP.

M. D. Teodoro, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, P. P. González-Borrero, E. Marega Jr., G. J. Salamo. Influência da orientação do substrato sobre as propriedades ópticas de poços quânticos de AlGaAs/GaAs. In: XXX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2007, São Lourenço - MG.

V. M. Lenart, P. P. González-Borrero, **M. D. Teodoro**, E. Laureto, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Marega Jr., G. J. Salamo, I. Mazzaro. Estudo óptico e estrutural de super-redes de GaAs/AlAs crescidas sobre diferentes orientações cristalográficas. In: XXX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2007, São Lourenço - MG.