



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

ORLANDO DE TONI JÚNIOR

**ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO DE POÇOS
QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS DE GaAs/AlGaAs**

Londrina
2010

ORLANDO DE TONI JÚNIOR

**ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO DE POÇOS
QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS DE GaAs/AlGaAs**

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

Orientador: Prof. Dr. José Leonil Duarte

Londrina
2010

Catálogo Elaborado pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da
Universidade Estadual de Londrina

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)

T665e Toni Júnior, Orlando de.

Espectroscopia de modulação de poços quânticos simples e duplos de
GaAs/AlGaAs / Orlando de Toni Júnior. – Londrina, 2010. 128 f.: il.

Orientador: José Leonil Duarte.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina,
Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2010.

1. Física da matéria condensada – Teses. 2. Poços quânticos – Teses. 3.
Espectroscopia de modulação – Teses. I. Duarte, José Leonil. II.
Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de
Pós-Graduação em Física. III. Título

CDU 539.2

ORLANDO DE TONI JÚNIOR

**ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO DE POÇOS QUÂNTICOS
SIMPLES E DUPLOS DE GaAs/AlGaAs**

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

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. José Leonil Duarte
UEL – Londrina – PR

Prof. Dr. Sidney Alves Lourenço
UTFP – PR

Prof. Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias
UEL – Londrina – PR

Londrina, 09 de abril de 2010.

*Aos meus pais, Orlando e Ledi pelo dom da vida, a
minha amada esposa, Leidileine, pelo amor, apoio e
compreensão e a minha filha Heloisa, razão do meu
viver.*

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos a todos que contribuíram para a realização deste trabalho, em especial:

Ao Prof. José Leonil Duarte, pela amizade, pela orientação, pelo incentivo e pela confiança.

Aos Profs. Ivan Frederico Lupiano Dias e Edson Laureto, pela amizade, pelo apoio e pelas dicas.

Ao amigo Leonardo pela ajuda na montagem de PR e com o qual tive o prazer em dividir a amizade, as discussões e as preocupações.

Aos amigos Dari de Oliveira Toginho e Júnior, pela constante ajuda na área da eletrônica.

Ao Prof. Alain André Quivy, por ter crescido as amostras.

Aos meus amigos da Física, em especial: Marco Aurélio, Flávio, Eralci, Élder e Fernando, pelas conversas e ajudas na área da informática.

A Dona Ignez Forte e ao Sr. José F. de A. Ortiz pelo apoio e incentivo nos momentos de desânimo.

Ao pessoal do Departamento de Física e do Laboratório de Óptica e Optoeletrônica.

Aos meus familiares, pela confiança e pelo incentivo.

À Capes e ao Departamento de Física – UEL, pelo apoio financeiro.

“Quando vislumbro o amanhã, também olho para o ontem e vejo o caminho tortuoso e cheio de adversidades que percorri até aqui, penso que se assim não tivesse sido, o gosto de uma conquista não teria o mesmo sabor.”

TONI JÚNIOR, Orlando de. **Espectroscopia de modulação de poços quânticos simples e duplos de GaAs/AlGaAs**. 2010. 128p. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Estadual de Londrina, 2010.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo principal estudar os estados fundamental e excitado de poços quânticos duplos acoplados (PQDAs) de GaAs/Al_xGa_{1-x}As com diferentes espessuras de “spikes”, em função da temperatura. Poços quânticos duplos acoplados simétricos correspondem a dois poços quânticos simples idênticos separados por uma barreira estreita, de tal maneira que ocorre uma sobreposição das funções de onda nos dois poços quânticos, devido aos efeitos de tunelamento. Esse acoplamento entre os poços faz com que o estado correspondente à partícula em um poço quântico isolado se separe, no PQDA, em estados simétrico e anti-simétrico, sendo que a diferença de energia entre os níveis depende da largura e da altura da barreira. Os PQDA têm despertado interesse tanto do ponto de vista acadêmico como do ponto de vista das aplicações tecnológicas. A técnica de fotoluminescência geralmente não permite obter as transições dos níveis excitados, devido ao fato dos elétrons (buracos) desses níveis decaírem para o nível fundamental através da emissão de fônons, antes deles se recombinarem radiativamente. Também não é possível obter espectros de absorção devido ao fato da luz incidente se absorvida pelo substrato de GaAs. Assim, uma possibilidade para estudar esses estados excitados é a técnica de fotorefletância (PR) ou a de eletrofletância (ER). Foram estudadas duas amostras, as quais possuem, no total, um poço quântico simples e três poços quânticos duplos de Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs com diferentes espessuras de barreira central. As medidas foram realizadas utilizando as técnicas de fotorefletância (PR) e de eletrofletância sem contato (CER). Para isso montamos um sistema de CER e utilizamos um sistema de PR que já dispúnhamos. Foram determinadas, em função da temperatura, as energias (E_p) das seguintes transições excitônicas: e_1-hh_1 e e_1-lh_1 do poço simples e e_1-hh_{1S} , e_1-lh_{1S} , e_1-hh_{1A} e e_1-lh_{1A} dos poços duplos. Foram também realizados ajustes das curvas de E_{PL} versus temperatura utilizando as expressões de Vinã e de Passler.

Palavras-Chave: Eletrofletância. Fotorefletância. Transição excitônica. Poços quânticos. Campo elétrico.

TONI JUNIOR, Orlando de. **Modulation Spectroscopy of single and double quantum wells GaAs / AlGaAs**. 2010. 128p. Dissertation (Master in Physics) - Londrina State University, 2010.

ABSTRACT

This work aims at studying the fundamental and excited states of coupled double quantum wells (CDQW) of GaAs/Al_xGa_{1-x}As with different spike thickness as a function of the temperature. Symmetric coupled double quantum wells correspond to two simple identical quantum wells separated by a narrow barrier in such a way that a wave function overlapping occurs in both quantum wells due to tunneling effects. This coupling between wells causes the corresponding state to the particle in an isolated quantum well to separate, in CDQW, in symmetrical and anti-symmetrical states so that the difference of energy between the levels depends on the width and height of the barrier. The CDQW have raised interest both academically and technologically. The technique of photoluminescence does not generally allow getting the transitions of excited levels due to the fact of electrons (holes) of these levels drop to the fundamental level through the emissions of phonons before they go together again radioactively. It is also not possible to obtain absorption spectrum because the incident light is absorbed by GaAs substrate. Thus, one possibility of studying these excited states is the technique of photoreflectance (PR) or the electroreflectance (ER). Two samples were analyzed which have altogether one simple quantum well and three double quantum wells of Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs with different central barrier thickness. The measures were gotten by using photo-reflection (PR) and contactless electroreflectance (CER). In order to do so, a CER system was set and an available PR system was used. In function of the temperature, it was determined the energy (E_p) of the following excitonic transitions: e_1-hh_1 e e_1-lh_1 of the single well and e_1-hh_{1S} , e_1-lh_{1S} , e_1-hh_{1A} e e_1-lh_{1A} of the double wells. Also, adjustments have been made in the curves of E_{PL} versus temperature by using Viña and Passler expressions.

Keywords: Electroreflectance. Fotorefletance. Excitonics transicions. Quantum well. Electrical field.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ordenamento espacial dos átomos em uma estrutura cristalina “zinc-blend. As esferas vazias representam os átomos de As e as esferas cheias os átomos de Ga ou Al ^[30]	22
Figura 2 – Primeira zona de Brillouin da rede cúbica de face centrada ^[30]	22
Figura 3 – Estrutura de bandas do GaAs e do AlAs ^[30]	23
Figura 4 – Variação do “gap” de energia da liga Al _x Ga _{1-x} As com a concentração de alumínio para os vales G e X. As curvas representam o comportamento do “gap” de energia direto (vale G) e indireto (vale X) em função da concentração de alumínio para T = 300 K (curvas sólidas) e T = 2 K (curvas tracejadas).	25
Figura 5 – A estrutura física e o perfil de potencial de um PQS. Essa heteroestrutura forma um poço de potencial retangular ao longo da direção de crescimento (z).	27
Figura 6 – Esquema do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento de um PQS. ΔE_c e ΔE_v são, respectivamente, os “offsets” da BC e da BV; e_1 e e_2 são os níveis de elétrons e hh_1 e lh_1 são os níveis de buraco pesado e leve, respectivamente.	28
Figura 7 – Penetração da função de onda dos portadores na região das barreiras de potencial $\phi(z)$ é a função de onda que descreve o estado do portador (no caso, o primeiro estado para elétrons na BC). A parte hachurada denota a penetração da função de onda nas barreiras de potencial.	29
Figura 8 – Representação do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento de um PQS. $\Delta E_{c(v)}$ representa o “offset” da BC(V).	30
Figura 9 – Função de onda associada aos estados par (a) e ímpar (b).	32
Figura 10 – Estrutura física e o perfil de potencial de um PQDA de GaAs/AlGaAs, com “spike” de AlGaAs. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos mini-poços e L_b é a espessura do “spike”	34

- Figura 11** – (a) Representação de uma barreira central suficientemente estreita (“spike”) para que haja interação das funções de onda dos poços quânticos individuais; devido ao efeito de tunelamento, as funções de onda sofrem um “overlap”; (b) Devido ao “overlap” das funções de onda, o nível de energia $|p = I\rangle$ sofre um “splitting”, gerando um nível simétrico $|p = IS\rangle$, de menor energia, e um nível anti-simétrico, $|p = IA\rangle$, de maior energia..... 35
- Figura 12** – Representação da estrutura de bandas e dos níveis de energia do PQDA. As transições só podem ocorrer entre os níveis simétrico de elétrons e simétrico de buracos ($e_{IS} \rightarrow hh_{IS}$) ou entre os níveis anti-simétrico de elétrons e anti-simétrico de buracos ($e_{IA} \rightarrow hh_{IA}$)..... 35
- Figura 13** – Representação da estrutura de bandas e dos níveis de energia do PQDA ao longo da direção de crescimento (z). 36
- Figura 14** – Esquema da largura efetiva L_w^* em um PQS. 44
- Figura 15** – Esquema idealizado das bandas de energia de um material (a) sem campo elétrico aplicado e (b) com campo elétrico aplicado na direção z (para a esquerda)..... 59
- Figura 16** – Comportamento das funções eletro-ópticas em função de $\eta = (E_g - E)/\hbar\Omega$. Podemos observar que estas funções têm uma forte singularidade em $\hbar\omega = E_g$ e exibem um comportamento oscilatório envolvido por uma função de decaimento exponencial para $E_g - E > 0$ (energias maiores que o “gap”) e decaem exponencialmente para $E_g - E < 0$ (energias menores que o “gap”)..... 63
- Figura 17** – Esquema de crescimento dos dois tipos de amostras disponíveis para a realização do trabalho..... 68
- Figura 18** – Esquema da montagem experimental utilizada na obtenção dos espectros de fotorefletância: 1 - Lâmpada, 2 - Lente $f = 11,5$ cm, 3 - Lente $f = 21,0$ cm, 4 - Espectrômetro, 5 - Lente $f = 10,5$ cm, 6 - Espelho, 7 - Sistema de controle de temperatura, 8 - Amostra, 9 - Criostato, 10 - Laser, 11 - Filtro, 12 - “Chopper”, 13 - Sistema de vácuo, 14 - Sistema de ciclo fechado de hélio, 15 - Lente $f = 4,5$ cm,

16 -Filtro, 17 -Fotodetector, 18 - Amplificador, 19 - “Lock –in”, 20 - Sistema de aquisição de dados, 21 - Micro-computador, 22 - Motor de passo.	71
Figura 19 – Esquema da montagem experimental utilizada na obtenção dos espectros de eletrorefletância sem contato: 1 - Lâmpada, 2 - Lente $f = 11,5$ cm, 3 - Lente $f = 21,0$ cm, 4 - Espectrômetro, 5 - Lente $f = 10,5$ cm, 6 - Espelho, 7 - Sistema de controle de temperatura, 8 - Amostra, 9 -Criostato, 10 – Fonte de alta tensão, 11 – Gerador de sinais, 12 - Osciloscópio, 13 - Sistema de vácuo, 14 - Sistema de ciclo fechado de hélio, 15 - Lente $f = 4,5$ cm, 16 - Filtro, 17 -Fotodetector 18 - Amplificador, 19 - “Lock –in”, 20 - Sistema de aquisição de dados, 21 - Micro-computador, 22 - Motor de passo.....	73
Figura 20 – Esquema da montagem no interior do criostato: 1-Porta amostra, 2 - Mica, 3 - Pasta térmica, 4 - Lâmina de cobre, 5 - Amostra, 6 - Lâmina de FTO, 7 - Sensor de temperatura, 8 – Espaçadores (borrachas), 9 – Fixadores (parafusos).	74
Figura 21 – Espectro de PR da amostra #8 obtido a 12 K.	85
Figura 22 – Espectro de PR da amostra #9 obtido a 12 K.	85
Figura 23 – Espectros de PR para a amostra #8: (a) de 12 K a 45 K; (b) de 50 K a 140 K; (c) de 160 K a 260 K. Os círculos vazios representam os resultados experimentais e a linha contínua em todos os espectros representa o ajuste.	88
Figura 24 – Espectros de PR para a amostra #9: (a) de 12 K a 45 K; (b) de 50 K a 140 K; (c) de 160 K a 260 K. A linha contínua em todos os espectros representa o ajuste.	89
Figura 25 – Espectros de CER para a amostra #8, de 66 K a 168 K. A linha contínua em todos os espectros representa os ajustes.....	91
Figura 26 – Espectros de CER para a amostra #9 de 66 K a 134 K. . A linha contínua em todos os espectros representa os ajustes.....	92
Figura 27 – Espectros de: a) CER a 70 K; b) PR a 70 K, para a amostra #8.....	94
Figura 28 – Espectros de: a) CER a 90 K; b) PR a 90 K, para a amostra #8.....	95
Figura 29 – Espectros de: a) CER a 70 K; b) PR a 70 K , para a amostra #9.....	96
Figura 30 – Espectros de: a) CER a 90 K; b) PR a 90 K , para a amostra #9.....	97

Figura 31 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQS: a) e_I-hh_I ; b) e_I-lh_I ; c) e_I-hh_{IB} .	102
Figura 32 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 15 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$; d) $e_{IA}-lh_{IA}$.	103
Figura 33 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 5 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$.	104
Figura 34 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 30 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$.	105
Figura 35 – EG X T pelos modelos de Vinã e Passler para o PQS: a) e_I-hh_I ; b) e_I-lh_I ; c) e_I-hh_{IB} .	107
Figura 36 – EG X T pelos modelos de Vinã e Passler para o PQDA “spike” 15 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$.	108
Figura 37 – EG X T pelos modelos de Vinã e Passler para o PQDA “spike” 5 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$.	109
Figura 38 – EG X T pelos modelos de Vinã e Passler para o PQDA “spike” 30 Å: a) $e_{IS}-hh_{IS}$; b) $e_{IS}-lh_{IS}$; c) $e_{IA}-hh_{IA}$.	107
Figura 39 – Comportamento dos parâmetros aB e QB do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição e_I-hh_{IS} : a_B e Q_B .	112
Figura 40 – Dependência da mobilidade eletrônica em função da espessura do “spike” para PQDA de GaAs/AlAs com mini-poços de diferentes larguras ^[72] . Para mini-poços de 40 Å de largura a mobilidade alcança o máximo para um “spike” de aproximadamente 5 Å de espessura.	114
Figura 41 – Poço quântico de GaAs/AlAs contendo um “spike” de AlAs no centro da estrutura. As funções de onda dos fônons de interface (ϕ_q) e dos fônons confinados (ϕ_c) são mostradas esquematicamente ^[85] .	114
Figura 42 – $ \phi_e ^2$ para os PQDAs com x = 0.25: (a) PQDA5; (b) PQDA15 e (c) PQDA30. Para as heteroestruturas com x = 0.15 e 0.35 o efeito geral é semelhante. Esses resultados foram obtidos através da utilização do “software” QWS (“Quantum Well Solver”) versão 2.0 ^[90] , desenvolvido por Roberto Yuji Tanaka e colaboradores no IEAv (Instituto de Estudos Avançados – São José dos Campos).	116

Figura 43 – Comportamento dos parâmetros α_B ; $\beta) \Theta_B$ do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição e_I-h_{IS} : a) α_B ; b) Θ_B 118

Figura 44 – Comportamento dos parâmetros α_B ; $\beta) \Theta_B$ do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição $e_{IA}-h_{IA}$: a) α_B ; b) Θ_B 119

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros dos materiais GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ^[78]	69
Tabela 2 – Tabela 2 – Correções dos valores de T para eletrorefletância sem contato	75
Tabela 3 – Níveis de energia calculados para o PQS com $x = 0,15$	78
Tabela 4 – Níveis de energia calculados para os PQDAs com $x = 0,15$	79
Tabela 5 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para o PQS com $x = 0,15$	80
Tabela 6 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para o PQDA com $x = 0,15$ de alumínio e “spike” 5 Å.....	81
Tabela 7 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para os PQDAs com $x = 0,15$ de alumínio e “spikes” 15Å e 30Å.	82
Tabela 8 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$) calculadas para o PQS e PQDA com “spike” 5 Å.	83
Tabela 9 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$) calculadas para os PQDAs com “spikes” 15 Å e 30 Å.	83
Tabela 10 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$); de PR a 12 K e de PL a 10 K, para o PQS e para o PQDA com “spike” 15 Å.....	86
Tabela 11 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$); de PR a 12 K e de PL a 10 K para os PQDAs com “spikes” 5 Å e 30 Å.	86
Tabela 12 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQS e PQDA com “spike” 15 Å a 70 K.....	98
Tabela 13 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQS e PQDA com “spike” 15 Å a 90 K.....	99
Tabela 14 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQDA com “spike” 5 Å e PQDA com “spike” 30 Å a 70 K.	100
Tabela 15 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQDA com “spike” 5 Å e PQDA com “spike” 30 Å a 90 K.	101
Tabela 16 – Valores obtidos para os parâmetros de ajuste do modelo de Viña para cada heteroestrutura.	111
Tabela 17 – Valores obtidos para os parâmetros de ajuste do modelo de Passler para cada heteroestrutura.....	111

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO GERAL	16
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	20
2.1 INTRODUÇÃO	20
2.2 OS MATERIAIS SEMICONDUTORES GAAS, ALAS E ALGAAS	21
2.3 O POÇO QUÂNTICO SIMPLES (PQS)	26
2.3.1 Níveis de Energia em PQS	30
2.4 O POÇO QUÂNTICO DUPLO ACOPLADO (PQDA)	33
2.4.1 Níveis de Energia em PQDAs	36
2.5 ÉXCITONS E EFEITOS DE CONFINAMENTO EM PQS	39
2.5.1 Éxcitons em Materiais “Bulk”	40
2.5.2 Éxcitons em PQS	42
2.5.3 Dimensionalidade em PQS: O Modelo MLC	43
2.5.4 Diferença entre a Massa Efetiva dos Portadores nos Materiais da Barreira e do Poço Quântico	45
2.5.5 Descasamento da Constante Dielétrica entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico e o Efeito das Cargas Imagem	47
2.5.6 Determinação da Energia de Ligação Excitônica	47
2.5.7 Dimensionalidade em PQDAs: Extensão do Formalismo MLC para PQDAs	48
2.6 MODELOS QUE DESCREVEM A VARIAÇÃO DO “GAP” DE ENERGIA COM A TEMPERATURA	49
2.6.1 Introdução	49
2.6.2 O Modelo de Varshni	50
2.6.3 O Modelo de Viña	52
2.6.4 O Modelo de Pässler - p	53
3 ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO	56
3.1 INTRODUÇÃO	56
3.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS DA FOTOREFLETÂNCIA E ELETROREFLETÂNCIA	57
3.2.1 Princípios Físicos da Fotorefletância e Eletrorefletância	57
3.2.2 A Variação da Função Dielétrica Provocada por uma Perturbação ξ	58

3.2.3 Efeitos de Campo Elétrico Aplicados a um Semicondutor	59
3.2.4 Formas de Linha	60
3.2.4.1 Regime de campo baixo	61
3.2.4.2 Regime de campo intermediário e o efeito Franz - Keldysh	62
3.2.5 Efeitos Excitônicos	64
4 AMOSTRAS E TÉCNICAS EXPERIMENTAIS	67
4.1 INTRODUÇÃO	67
4.2 AMOSTRAS	67
4.2.1 Parâmetros dos Materiais das Amostras	69
4.3 A TÉCNICA DE FOTOREFLETÂNCIA	70
4.3.1 Sistema Experimental de Fotorefletância	70
4.4 A TÉCNICA DE ELETROREFLETÂNCIA SEM CONTATO	72
4.4.1 Sistema Experimental de Eletrorefletância sem Contato	72
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	76
5.1 INTRODUÇÃO	76
5.2 ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA E ENERGIA DE TRANSIÇÃO EXCITÔNICA DO PQS E DOS PQDAs.....	76
5.2.1 Níveis de Energia do PQS	76
5.2.2 Níveis de Energia dos PQDAs	78
5.2.3 Cálculo da Energia de Ligação Excitônica no PQS	79
5.2.4 Cálculo da Energia de Ligação Excitônica nos PQDAs.....	81
5.2.5 Cálculo da Energia de Transição Óptica no PQS e nos PQDAs	82
5.3 RESULTADOS EXPERIMENTAIS: FOTOREFLETÂNCIA À BAIXA TEMPERATURA	84
5.4 RESULTADOS EXPERIMENTAIS: ELETROREFLETÂNCIA SEM CONTATO À BAIXA TEMPERATURA	92
5.4.1 Comparação entre Espectros de CER e de PR	93
5.5 ENERGIA DE GAP EM FUNÇÃO DE T.	102
5.6 AJUSTES DAS CURVAS DE $E_G \times T$ PELOS MODELOS DE VIÑA E PASSLER.	105
5.6.1 Análise dos Parâmetros a_B e Θ_B do Modelo de Viña em Função da Espessura do “Spike”.	112
5.6.1.1 Transição $e_{1S} - h_{1S}$	112
5.6.1.2 Transições $e_{1S} - h_{1S}$ e $e_{1A} - h_{1A}$	118

6 CONCLUSÕES..... 120

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 124

INTRODUÇÃO GERAL

No desenvolvimento do ramo da eletricidade, estudaram-se as propriedades dos componentes básicos como resistores, capacitores e indutores, entretanto havia a necessidade de se obter novos dispositivos para o controle da corrente elétrica. Em meados do século XIX (1833 e 1839), Faraday e Becquerel descobrem as propriedades dos semicondutores, porém, não houve utilização prática destas até o término da Segunda Guerra Mundial ^[1] quando, em 1947 Willian Shochley, John Bardeen e Walter Brattain (Nobel de 1956) ^[2] inventaram o transistor em substituição a válvula.

No transcorrer das décadas, vários dispositivos além do transistor e do diodo, foram criados baseados nas propriedades dos semicondutores, tais como: os circuitos integrados, em 1960; o desenvolvimento da memória do tipo DRAM, em 1967, e a criação do primeiro microprocessador, em 1971, permitindo assim a construção dos computadores como os conhecemos hoje ^[2]. Apesar do silício cristalino ser o principal material utilizado na fabricação de dispositivos eletrônicos, atualmente outros materiais semicondutores como, por exemplo, o arseneto de gálio (GaAs), desempenham um papel fundamental no campo da optoeletrônica ^[2].

Com o desenvolvimento de técnicas de crescimento de materiais semicondutores com precisão atômica, dentre as quais se destaca a técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE – do inglês “molecular beam epitaxy”), foi possível fabricar heteroestruturas baseadas em materiais semicondutores com alto grau de confiabilidade para o valor das espessuras, propiciaram a composição, morfologia e cristalinidade das camadas crescidas ^[3]. Essas heteroestruturas possibilitaram a confecção de dispositivos eletrônicos em nível quântico, com dimensões na escala nanométrica.

Várias heteroestruturas podem ser produzidas através das técnicas de crescimento de materiais semicondutores, como, por exemplo: os poços quânticos simples (PQS), os poços quânticos duplos acoplados (PQDAs), as super-redes (SRs), os fios quânticos (FQs) e os pontos quânticos (PQs) ^[4]. Atualmente essas heteroestruturas são empregadas na fabricação de uma grande variedade de dispositivos, tais como: lasers ^[5], transistores eletrônicos de alta mobilidade ^[6], diodos emissores de luz ^[7], chaves eletro-ópticas ^[8], moduladores ^[9], entre outros.

Os PQDAs são heteroestrutura que apresentam propriedades elétricas e ópticas de grande interesse, devido à sua importância tanto do ponto de vista das aplicações

tecnológicas, na criação de novos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, quanto do ponto de vista da pesquisa acadêmica, na observação de novos efeitos físicos. Essa estrutura corresponde a dois poços quânticos simples (mini-poços) separados por uma barreira estreita (“spike”), de tal maneira que ocorre uma sobreposição das funções de onda nos dois mini-poços, devido aos efeitos de tunelamento. Como exemplos de aplicações tecnológicas de PQDAs podemos citar a sua utilização na confecção de dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos tais como: transistores de efeito de campo (FETs)^[10], detectores “terahertz” sintonizáveis^[11], moduladores^[12,13], lasers^[14], etc.. Com relação à pesquisa acadêmica, o efeito de acoplamento entre os mini-poços em PQDAs estruturalmente otimizados pode gerar: mudanças no índice de refração^[15], amplificação luminosa^[16], alterações na mobilidade eletrônica^[17], e a intensificação do efeito Stark confinado quanticamente^[18].

O estudo das propriedades ópticas de materiais e de heteroestruturas de materiais semicondutores é realizado, geralmente, através de técnicas de espectroscopia óptica, tais como a fotoluminescência (PL - do inglês “photoluminescence”), a fotoluminescência de excitação (PLE - do inglês “excitation photoluminescence”) ou a espectroscopia de modulação como a fotoreletância (PR - do inglês “photorelectance”), a eletrorefletância (ER - do inglês “electroreflectance”) e, recentemente, a eletrorefletância sem contato (CER - do inglês “contactless electroreflectance”). Essas técnicas destacam-se não só pelas várias informações fornecidas (determinação do “gap”, níveis de impurezas, campo elétrico interno, defeitos na interface, etc.) mas também por possuírem um caráter não destrutivo.

O estudo das propriedades ópticas e elétricas de materiais e estruturas de materiais semicondutores em função da temperatura é importante, tanto do ponto de vista da física básica como do ponto de vista das aplicações tecnológicas. Do ponto de vista da física básica pode-se, por exemplo, obter informações sobre o comportamento da forma da estrutura de bandas do material com a temperatura quando, em diferentes regiões de um mesmo espectro óptico, duas ou mais estruturas espectrais, associadas com diferentes pontos críticos da estrutura de bandas, apresentam comportamentos distintos com a temperatura. Pode-se citar, como exemplos para aplicações tecnológicas, a variação do índice de refração com a temperatura (importante para projetar conversores de energia solar) e a alteração na resposta de moduladores e detectores^[19] provocada pela variação do “gap” de energia com a temperatura.

A partir de 1960, muitos pesquisadores voltaram à atenção para a obtenção de modelos que propunham expressões de ajuste para a variação do “gap” de energia com a

temperatura, embora a relação dos parâmetros obtidos através destes modelos com os mecanismos físicos envolvidos no processo sejam motivo de intensa discussão na literatura científica^[20,21]. Alguns destes modelos são puramente empíricos, fornecendo parâmetros sem significado físico como, por exemplo, o modelo proposto por Varshni em 1967^[20]. Entretanto, outros modelos são semi-empíricos (com equações que contém, em suas estruturas, por exemplo, a distribuição estatística de Bose-Einstein), como os modelos de Viña e colaboradores (1984)^[22] e de Pässler (1996)^[23].

Sabe-se que a variação do “gap” de energia em função da temperatura ocorre devido à contribuição de dois mecanismos distintos: a interação elétron-fônon (IEF) e a expansão térmica da rede (ETR)^[24,25,26,27]. Entretanto, como a contribuição dominante é a IEF^[25,28,29], a maioria dos modelos teóricos foram desenvolvidos levando em consideração apenas esse mecanismo, como é o caso dos modelos de Viña e de Pässler.

Este trabalho tem como objetivo geral estudar os estados fundamentais e, principalmente, os estados excitados, de PQDAs de GaAs/Al_xGa_{1-x}As com diferentes espessuras de “spikes”, em função da temperatura. Com essa intenção foi montado um sistema de eletrorefletância sem contato (CER), afim de complementar as informações obtidas através da técnica de fotorefletância (FR) para os PQDAs. Esse objetivo geral pode ser dividido em etapas que foram realizadas:

- i)* cálculo dos níveis de energia e da energia de ligação excitônica do nível fundamental e excitado do PQS e PQDAs;
- ii)* determinação teórica das energias de transição excitônica dos níveis fundamental e excitados dos PQS e PQDAs;
- iii)* montagem de um sistema de eletrorefletância sem contato (CER) ;
- iv)* realização de medidas de CER e de FR e comparação das mesmas;
- v)* determinação experimental das energias de transição excitônica em função da temperatura através da obtenção de espectros de CER ou FR, com variação de temperatura;
- vi)* análise das energias de transição excitônica em função da temperatura;
- vii)* estudo do comportamento da interação elétron-fônon em função da espessura do “spike” em PQS e PQDAs, através da análise dos parâmetros extraídos a partir do ajuste das curvas experimentais da variação da energia de transição excitônica com a temperatura através do modelo de Viña e Pässler.

A seqüência deste trabalho está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica necessária à análise e à discussão dos resultados

relacionados aos objetivos *i*) e *iv*) do trabalho. São apresentados subitens que discutem: as propriedades eletrônicas de confinamento de heteroestruturas (2.2, 2.3, 2.4 e 2.5); os modelos que descrevem a variação do “gap” de energia com a temperatura (2.6). O capítulo 3 refere-se ao estudo da espectroscopia de modulação necessário à análise e discussão dos resultados relacionados ao objetivo *ii*). O Capítulo 4 é destinado à descrição das amostras e das técnicas experimentais utilizadas no trabalho. O Capítulo 5 é dedicado à apresentação, análise e discussão dos resultados teóricos e/ou experimentais. Este capítulo está dividido em subitens que discutem: a energia de ligação excitônica e a energia de transição excitônica em PQS e PQDAs (5.2); e os resultados das medidas de fotorefletância e eletrorefletância sem contato (5.3 e 5.4) e o resultados obtidos para a interação elétron-fônon nos PQS e PQDA através da utilização do modelo de Viña e Pässler (5.5 e 5.6). Por final, o Capítulo 6 é dedicado às conclusões gerais e à apresentação das possíveis extensões do trabalho.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 INTRODUÇÃO

Com o avanço tecnológico surgiram novas técnicas de crescimento de materiais semicondutores, sendo uma das principais delas a técnica de epitaxia por feixe molecular, BEM. Essa técnica permite a deposição física de filmes finos com espessura altamente controlada e com alto grau de pureza^[3].

A técnica de MBE pode ser usada para produzir uma heteroestrutura semicondutora chamada poço quântico, que é formada intercalando uma camada de material semicondutor com “gap” menor entre duas camadas semicondutoras com “gap” maior. Neste trabalho foram estudadas duas estruturas: o Poço Quântico Simples (PQS) e o Poço Quântico Duplo Acoplado (PQDA). O semicondutor de “gap” menor usado foi o binário GaAs e o de “gap” maior foi a liga ternária AlGaAs.

O GaAs e o AlGaAs são materiais semicondutores amplamente utilizados na confecção de uma série de heteroestruturas de grande interesse para a pesquisa básica e para as aplicações tecnológicas. Uma das vantagens do sistema GaAs/AlGaAs é a possibilidade de se variar a concentração de alumínio (designada pelo subscrito x) na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, para a obtenção de barreiras mais altas, sem provocar o surgimento de tensões entre os materiais. Além disso o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é um material de “gap” direto até concentrações de alumínio de aproximadamente $x = 0,4$ permitindo a fabricação de heteroestruturas de alta eficiência, e com propriedades ópticas em regiões de energia de grande interesse tecnológico.

O poço quântico produz um confinamento bidimensional dos portadores de carga, e o resultado desse efeito é a discretização dos níveis de energia. Esse efeito de confinamento quântico altera algumas propriedades do sistema, sendo a principal delas o aumento da energia de ligação do éxciton. No PQ a energia de ligação do éxciton pode ser até 4 vezes maior que no material volumétrico (“bulk”), o que permite que a emissão excitônica seja observada mesmo à temperatura ambiente.

As novas propriedades elétricas e ópticas apresentadas por poços quânticos duplos acoplados provocaram um impacto tanto do ponto de vista tecnológico, na obtenção de características desejáveis para a aplicação em dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, quanto do ponto de vista da pesquisa acadêmica, na observação de novos efeitos físicos.

Nesta seção será realizada uma revisão das principais propriedades das heteroestruturas a serem estudadas no presente trabalho. Inicialmente serão apresentadas algumas informações relevantes sobre o GaAs “bulk” e sobre a liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Em seguida será feita uma revisão sobre o cálculo dos níveis de energia dos portadores em poços quânticos simples e poços quânticos duplos acoplados. Na seqüência serão discutidos os efeitos excitônicos e os detalhes do cálculo da energia de ligação excitônica nessas estruturas, através do método MLC. Finalmente serão apresentados os modelos que descrevem a variação do “gap” de energia com a temperatura (Varshni, Viña e Pässler).

2.2 OS MATERIAIS SEMICONDUTORES GAAS, ALAS E ALGAAS

Os materiais que compõem as amostras estudadas, o GaAs e o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, onde o índice x representa a porcentagem de Al no material, pertencem à família dos compostos III – V. Esses materiais têm sido estudados há algumas décadas e, portanto, suas propriedades são bastante conhecidas. Os compostos III - V se cristalizam na estrutura “zinc-blend” (“spharelite”) que consiste de duas redes cúbicas de face centrada (f.c.c) interpenetradas, deslocadas uma da outra por um quarto da diagonal principal de um cubo de lado a ^[30]. A estrutura “zinc-blend” possui uma base formada por dois átomos distintos, por exemplo, o Ga (III) e o As (V) no GaAs, sendo que os átomos de Ga ligam-se, via ligações covalentes, apenas com átomos de As e os átomos de As ligam-se apenas com átomos de Ga (ou de alumínio, no caso do AlAs)^[31]. Se os dois átomos da base forem idênticos, a estrutura é chamada de estrutura do diamante. Semicondutores tais como Si, Ge e C pertencem a esta categoria. A Figura 1 mostra uma representação da estrutura “zinc-blend”.

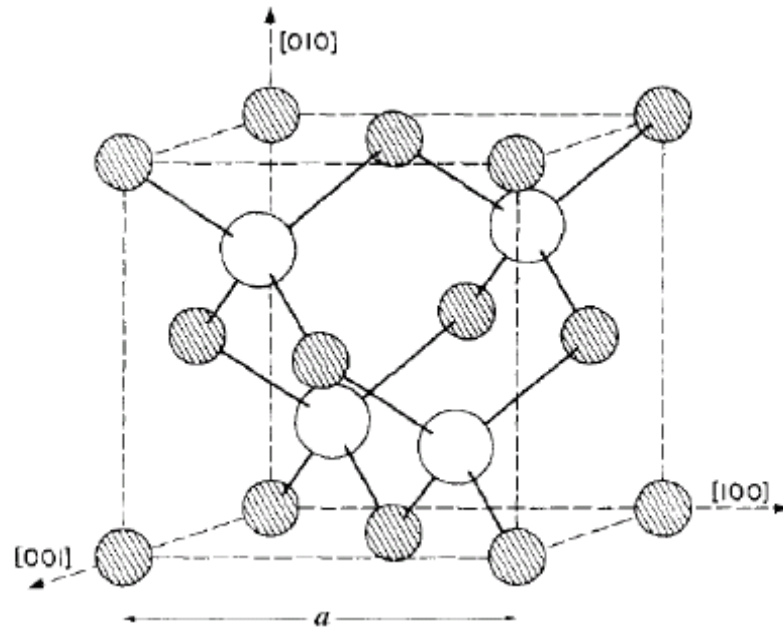


Figura 1 – Ordenamento espacial dos átomos em uma estrutura cristalina “zinc-blend. As esferas vazias representam os átomos de As e as esferas cheias os átomos de Ga ou Al^[30].

A rede recíproca da rede cúbica de face centrada é a rede cúbica de corpo centrado. A primeira zona de Brillouin desta rede recíproca é um octaedro truncado. Na Figura 2 apresentamos a primeira zona de Brillouin e alguns de seus pontos de alta simetria.

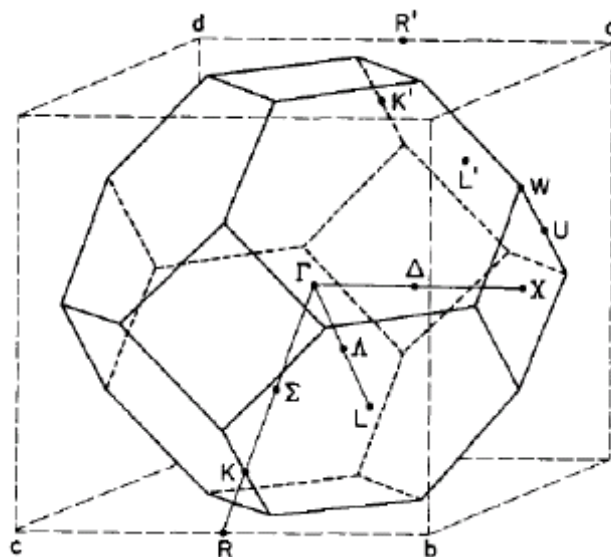


Figura 2 – Primeira zona de Brillouin da rede cúbica de face centrada^[30].

Na Figura 3 apresentamos as estruturas de bandas eletrônicas do GaAs e do AlAs. No GaAs o “gap” é direto, ou seja, o mínimo da banda de condução e o topo da banda de valência estão localizados no mesmo ponto de alta simetria $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$ da zona de Brillouin e têm a forma característica dos semicondutores de estrutura cristalina do tipo “zinc-blend”. Nesse caso a transição é representada por E_g^Γ , obtendo-se, $E_g^\Gamma = 1,5194$ eV para $T = 2$ K e $1,420$ eV para $T = 300$ K. No AlAs o “gap” é indireto, ou seja, o menor intervalo de energia entre o fundo da banda de condução e o topo da banda de valência não ocorre no mesmo ponto da rede recíproca, mas entre os pontos X (na BC) e Γ (na BV) obtendo-se, $E_g^{\Gamma-X} = 2,229$ eV para $T = 4$ K e $2,153$ eV para $T = 300$ K.

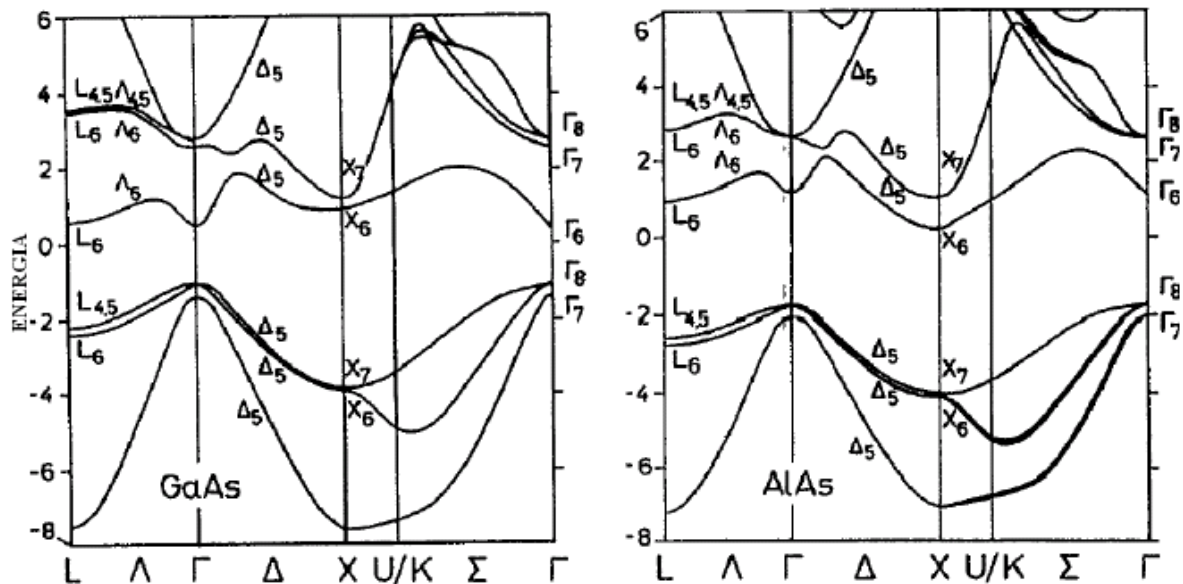


Figura 3 – Estrutura de bandas do GaAs e do AlAs^[30].

Podemos obter vários parâmetros de compostos ternários, tais como parâmetro de rede (a), massa efetiva do elétron e dos buracos (m_e^* , m_h^*) e constante dielétrica (ϵ), por meio de interpolação simples, como função linear dos parâmetros de compostos binários, ou como função dos binários acrescentando-se as correções introduzidas por medidas experimentais. Estas medidas geram os denominados termos de “bowing”, que são termos quadráticos que carregam a dependência de determinados parâmetros com a composição relativa dos materiais.

Para o parâmetro de rede (a) da liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ podemos utilizar uma interpolação linear simples obtendo-se (em Å)^[32]:

$$a^{AlGaAs}(x) = 5,6533 + 0,0078x \quad (1)$$

Podemos verificar através da Equação (1) que a diferença entre o parâmetro de rede do GaAs e o do AlAs é de apenas 0,14% a $T = 300$ K. O bom casamento entre os parâmetros de rede destes dois materiais para qualquer valor de x , a diferença entre os “gaps” de energia (que é controlada pela proporção de alumínio na liga $Al_xGa_{1-x}As$) e a excelente mobilidade eletrônica do GaAs são as principais características que tornaram estes materiais os mais utilizados na fabricação de heteroestruturas.

Para a liga $Al_xGa_{1-x}As$, que forma a região da barreira, as massas efetivas de elétrons e buracos leve e pesado podem ser dadas em função de x (em termos de m_0 – massa de repouso do elétron = $9,109 \times 10^{-31}$ Kg)^[33]:

$$\begin{aligned} m_e^*(x) &= (0,0667 + 0,083x)m_0 \\ m_{hh}^*(x) &= (0,34 + 0,42x)m_0 \\ m_{lh}^*(x) &= (0,094 + 0,043x)m_0 \end{aligned} \quad (2)$$

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

A constante dielétrica para a liga $Al_xGa_{1-x}As$ pode ser dada por^[33]:

$$\varepsilon^{AlGaAs}(x) = 12,5(1 - x) + 9,8x \quad (3)$$

Para se obter o “gap” de energia da liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$ é necessário utilizar o termo de “bowing”, obtendo-se:

$$E_g^{AlGaAs}(x) = xE_g^{AlAs} + (1 - x)E_g^{GaAs} - x(1 - x)C^{AlGaAs} \quad (4)$$

onde C^{AlGaAs} é a constante de “bowing” para o ternário em análise. Considerando os resultados obtidos por S. Adachi^[34] para os termos de “bowing” para os vales Γ e X da banda de condução pode-se obter $E_g(x)$. À temperatura de 300 K tem-se (em meV):

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

Considerando, de acordo com S. Adachi^[34], que as constantes de “bowing” não dependem da temperatura, em $T = 2$ K tem-se (em meV):

$$\begin{aligned} E_g^\Gamma(x) &= 1519,4 + 1420x + 370x^2 \\ E_g^X(x) &= 1987 + 3x + 245x^2 \end{aligned} \quad (6)$$

Na Figura 4 apresentamos o comportamento do “gap” de energia em função da concentração de alumínio para $T = 300$ K e $T = 2$ K, obtido através das Equações (5) e (6).

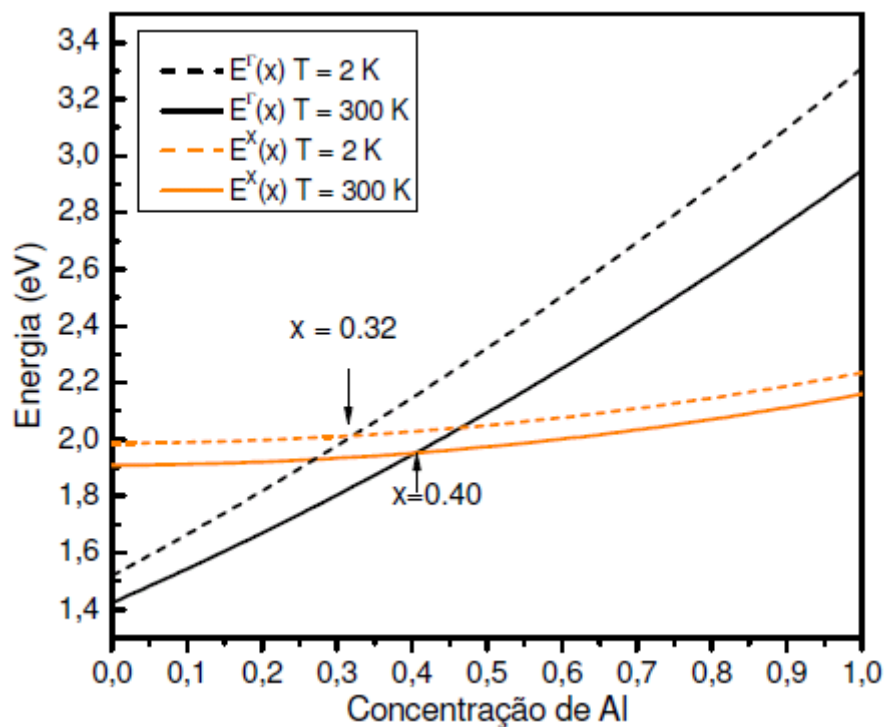


Figura 4 – Variação do “gap” de energia da liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com a concentração de alumínio para os vales Γ e X. As curvas representam o comportamento do “gap” de energia direto (vale Γ) e indireto (vale X) em função da concentração de alumínio para $T = 300$ K (curvas sólidas) e $T = 2$ K (curvas tracejadas).

A transição de “gap” direto, (Γ), para “gap” indireto, (X), a $T = 300$ K ocorre em $x \sim 0,40$ e a $T = 2$ K em $x \sim 0,32$. Embora o AlGaAs seja um material muito estudado, existem na literatura diferentes expressões para E_g^Γ e E_g^X ; isto ocorre em função da dispersão de valores encontrados para os termos de “bowing” devido aos valores dos “gaps” de energia obtidos por diferentes técnicas^[34-36]. Entretanto, a transição de “gap”

direto para indireto é geralmente considerada no intervalo $0,40 < x < 0,45$, para $T = 300 \text{ K}$ ^[19, 35,37].

Neste trabalho, iremos considerar que a diferença entre o “gap” de energia do GaAs e do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é dada por (em meV)^[33]:

$$\Delta E(x) = 1,455x \quad (7)$$

e que os “off-sets” (vide item 2.3) da banda de condução (ΔE_c) e da banda de valência (ΔE_v) sejam dados, respectivamente, por^[34]:

$$\Delta E_c(x) = 0,65\Delta E(x) \quad (8)$$

e

$$\Delta E_v(x) = 0,35\Delta E(x) \quad (9)$$

2.3 O POÇO QUÂNTICO SIMPLES (PQS)

Um poço quântico simples (PQS) é um sistema composto por materiais semicondutores de “gaps” diferentes, sendo que uma camada do material de “gap” menor é intercalada entre duas camadas do material de “gap” maior. Como o GaAs e o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ têm a estrutura cristalina e energética muito parecidas e levando-se em conta que o “gap” do GaAs é direto e para baixas concentrações de Al ($x < 0,4$) o “gap” do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ também é direto, é possível construir uma heteroestrutura colocando uma fina camada de GaAs entre duas camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ formando o poço quântico simples (PQS). A espessura da camada de GaAs, ao longo da direção de crescimento, z , define a largura física do poço quântico, L_w , enquanto que a espessura do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ define a região das barreiras de potencial (Figura 5).

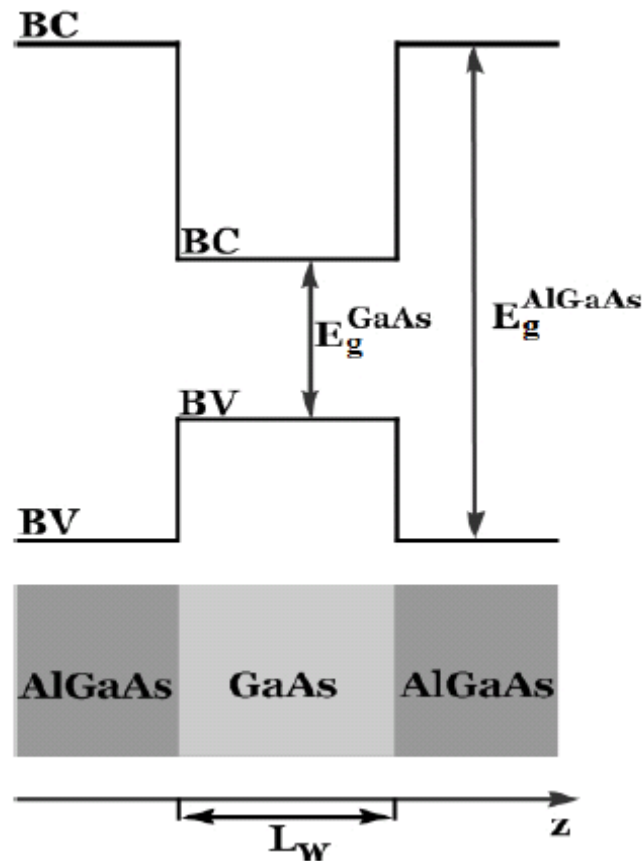


Figura 5 – A estrutura física e o perfil de potencial de um PQS. Essa heteroestrutura forma um poço de potencial retangular ao longo da direção de crescimento (z).

A profundidade dos poços de potencial para os portadores, denominadas “offset” das bandas de condução (ΔE_c) e de valência (ΔE_v), são definidas a partir da descontinuidade do “gap” de energia, $\Delta E(x)$, entre os dois materiais que constituem o poço. Porém, essa diferença de energia não é igualmente distribuída entre os “offsets” da BC e da BV, sendo que a porcentagem maior desta diferença fica para o “offset” da BC (cerca de 65% no caso do sistema GaAs/AlGaAs). Fisicamente, isso representa uma profundidade maior para o poço de potencial para elétrons em relação ao poço de potencial para buracos. A variação da descontinuidade do “gap” de energia, $\Delta E(x)$, em função da concentração de alumínio x é dada pela Equação (7) e os “offsets” da BC e da BV são dados, respectivamente, pelas Equações (8) e (9).

A Figura 6 mostra o esquema do potencial do PQS ao longo da direção z . O perfil de potencial gerado pelo sistema restringe o movimento dos portadores ao longo desta direção, de forma que estes apenas tenham movimento livre no plano perpendicular à direção de crescimento (plano xy). Como uma consequência direta do confinamento dos portadores ao

longo da direção z , a energia referente ao movimento destes, nesta direção, torna-se quantizada, gerando níveis discretos de energia para elétrons na BC e para buracos (pesado e leve) na BV.

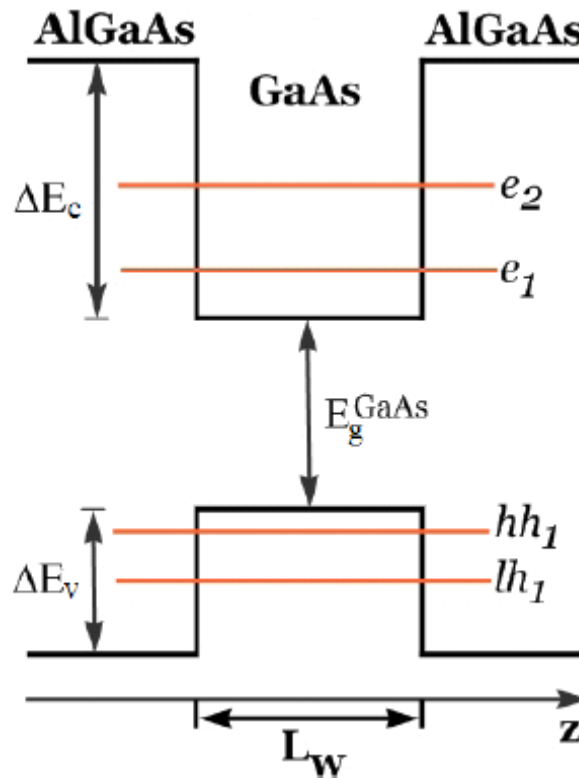


Figura 6 – Esquema do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento de um PQS. ΔE_c e ΔE_v são, respectivamente, os “offsets” da BC e da BV; e_1 e e_2 são os níveis de elétrons e hh_1 e lh_1 são os níveis de buraco pesado e leve, respectivamente.

Os níveis de energia dos portadores no poço quântico são totalmente distintos daqueles que estes possuíam nos materiais “bulk” GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. A energia dos níveis permitidos para os portadores, bem como a energia que separa estes níveis, pode aumentar por meio de dois mecanismos: *i*) a redução da largura L_w do poço quântico, determinada pela espessura do GaAs ou *ii*) o aumento do potencial de confinamento, determinado pela concentração de alumínio, x , na liga ternária. Assim, para um determinado PQS com parâmetros x e L_w , os níveis de energia gerados serão característicos e exclusivos deste poço quântico.

Na aproximação do poço quântico infinito, devido a ortogonalidade das funções de onda, apenas transições entre os estados confinados da banda de valência e condução com mesmo número quântico principal n são permitidos (regra de seleção $\Delta n = 0$).

Logo, só ocorrerão, por exemplo, transições entre o primeiro nível de elétron e os primeiros níveis de buraco pesado e leve, entre o segundo nível de elétron e os segundos níveis de buraco pesado ou leve, e assim sucessivamente. Entretanto, para poços quânticos finitos as funções de onda não são exatamente ortogonais, conduzindo a observação de transições com diferente n 's (quebra da regra de seleção); contudo, tanto nos espectros de emissão como de absorção, as transições mais fortemente observáveis são aquelas referentes à regra de seleção^[38].

Outro fator interessante a se analisar é a função de onda destes portadores. Em poços quânticos finitos (reais), a função de onda que descreve o estado dos portadores penetra nas barreiras de potencial (decaindo exponencialmente no interior das mesmas – Figura 7), ao contrário do que ocorre com um sistema ideal (poço infinito), em que as funções de onda dos portadores ficam totalmente confinadas na região do poço. Fisicamente, a penetração da função de onda na região das barreiras significa que os portadores de carga podem ser encontrados não só na região do poço, mas também na região das barreiras de potencial. Esse efeito tem conseqüências importantes nas propriedades ópticas e de transporte de heteroestruturas e é aplicado de forma prática em muitos dispositivos semicondutores.

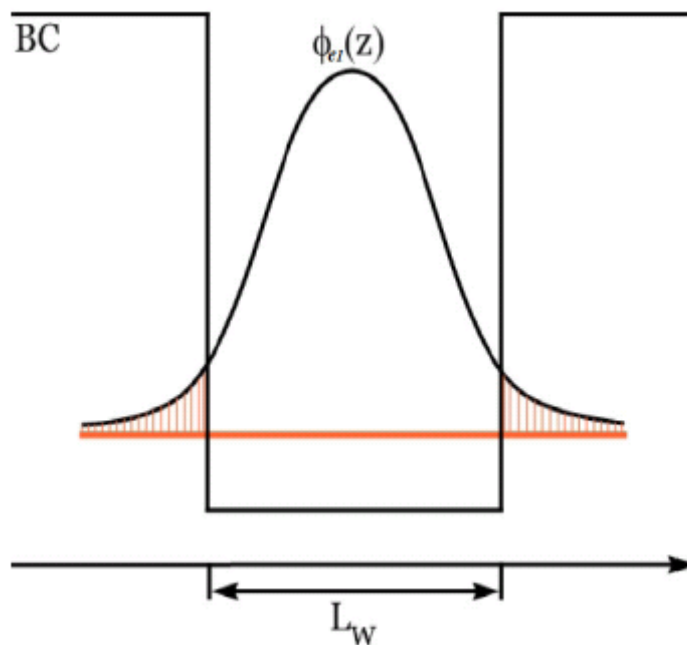


Figura 7 – Penetração da função de onda dos portadores na região das barreiras de potencial. $\phi(z)$ é a função de onda que descreve o estado do portador (no caso, o primeiro estado para elétrons na BC). A parte hachurada denota a penetração da função de onda nas barreiras de potencial.

2.3.1 Níveis de Energia em PQS

Em um PQS os portadores de carga ficam sujeitos à ação do potencial $V(z)$ (Figura 8), dado por:

$$V(z) = \begin{cases} \Delta E_{c(v)} & \text{se } |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & \text{se } |z| < \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (10)$$

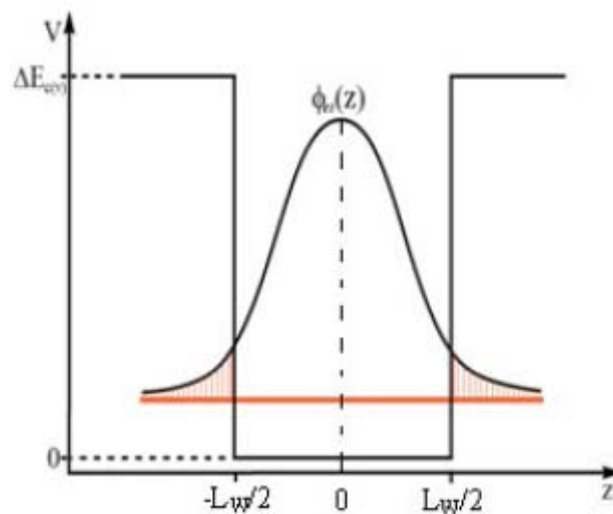


Figura 8 – Representação do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento de um PQS. $\Delta E_{c(v)}$ representa o “offset” da BC(V).

Visto que este potencial é independente do tempo, o movimento dos portadores de carga ao longo da direção de confinamento pode ser descrito pela função de onda $\phi(z)$, que é solução da equação de Schrödinger espacial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + V(z)\phi(z) = E_p\phi(z) \quad (11)$$

onde m^* é a massa efetiva, $V(z)$ é o potencial do poço, descrito pela Equação (10), e E_p é a energia associada ao nível ocupado pelo portador. As soluções da equação (11) são as seguintes:

$$\phi_w(z) = A \sin(k_w z + \varphi) \quad \text{para a região } |z| < \frac{L_w}{2} \quad (12)$$

e

$$\phi_w(z) = B \exp(\kappa_b z) \quad \text{para a região } |z| > \frac{L_w}{2} \quad (13)$$

onde k_w e κ_b representam, respectivamente, os vetores de onda no interior do poço e na região das barreiras, e são definidos como:

$$k_{we(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(h)}^* E_p} \quad (14)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (15)$$

onde m_w^* e m_b^* são, respectivamente, as massas efetivas dos portadores nas regiões do poço e das barreiras de potencial, $\Delta E_{c(v)}$ é o potencial do poço (o índice c representa o potencial do poço para elétrons (e) e o índice v representa o potencial do poço para buracos (h)), E_p é a energia do p -ésimo estado ocupado pelo portador no poço quântico e φ é uma fase.

Aplicando as condições de continuidade das funções de onda dadas pelas Equações (12) e (13) e de suas derivadas nas interfaces ($\pm L_w/2$), obtém-se a seguinte equação^[39]:

$$k_w L_w = p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{k_w / m_w^*}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \quad (16)$$

em que $p = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal e indexa os níveis de energia. O termo $p\pi$ está diretamente ligado à fase φ da função de onda no poço (Equação (12)). As funções de onda dos estados pares são descritos por funções do tipo *coseno* (Figura 9a), enquanto que estados ímpares são descritos por funções do tipo *seno* (Fig. 9b). A Equação (16) é uma equação transcendental e, por esta razão, suas soluções, isto é, as auto-energias E_p associadas aos estados dos portadores no poço, só podem ser obtidas numericamente e/ou graficamente.

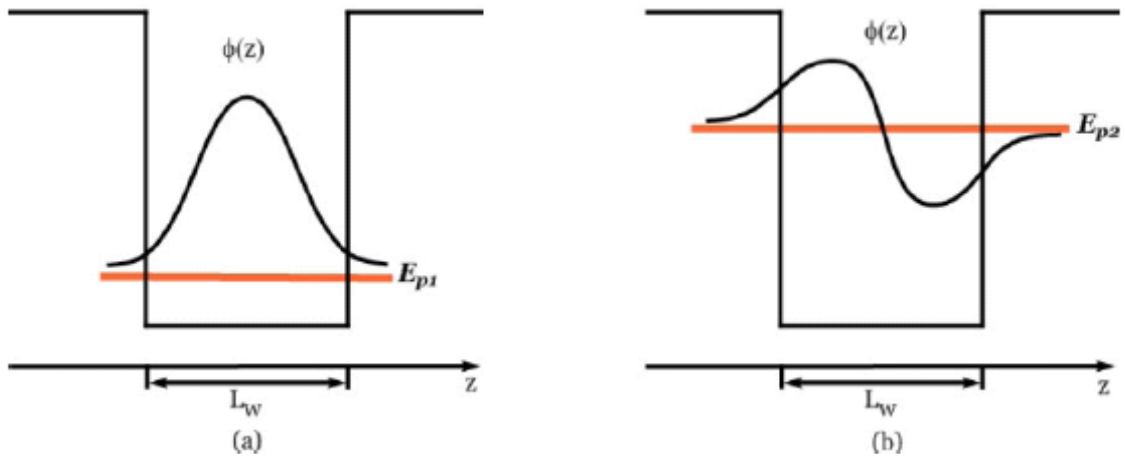


Figura 9 – Função de onda associada aos estados par (a) e ímpar (b).

Contudo, como a massa geralmente é dada em *quilogramas* (Kg) e a energia em *elétron-volts* (eV), para utilizá-las nessas unidades nas expressões de k_w (Equação (14)) e de κ_b (Equação (15)) e ter os resultados em m^{-1} , é necessário introduzir um fator multiplicativo. Se \hbar for dado em *elétron-volts vezes segundo* ($eV \times s$) esse fator será:

$$2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \quad (17)$$

Portanto, os vetores de onda podem ser expressos como:

$$k_w (m^{-1}) = 2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_w^* (Kg) E (eV)}}{\hbar (eV \times s)} \quad (18)$$

e

$$\kappa_b (m^{-1}) = 2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_b^* (Kg) (\Delta E_{c(v)} - E) (eV)}}{\hbar (eV \times s)} \quad (19)$$

As unidades entre parêntesis são aquelas em que os parâmetros devem estar. Dessa maneira, a energia será dada em *elétron-volts*.

Pode-se notar que os vetores de onda estão expressos em função da energia E . Consequentemente, para se calcular os níveis de energia E_p , deve-se substituir as Equações (18) e (19) na Equação (16) e, então, representar, em um mesmo gráfico, as seguintes expressões:

$$k_w L_w \text{ versus } E \quad (20)$$

e

$$p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{k_w / m_w^*}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \text{ versus } E \quad (21)$$

onde $p = 1, 2, 3, \dots$. Como ambas as expressões são funções apenas de E , a intersecção das curvas fornece o valor do nível de energia E_p em eV .

2.4 O POÇO QUÂNTICO DUPLO ACOPLADO (PQDA)

Um poço quântico duplo acoplado (PQDA) é uma heteroestrutura composta de dois poços quânticos simples (também chamados de mini-poços) separados por uma fina barreira (também chamada de “spike”), a qual é composta do mesmo material das barreiras laterais do poço e deve ser estreita o suficiente para que as funções de onda dos poços quânticos simples possam interagir. Um PQDA de GaAs/AlGaAs, por exemplo, pode ser preparado alternando-se o crescimento de camadas (com diferentes espessuras) de AlGaAs e GaAs, como ilustrado na Figura 10.

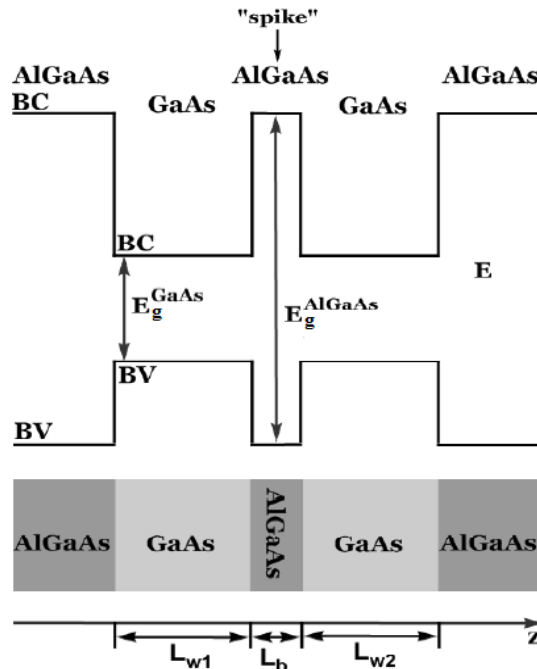


Figura 1 – Estrutura física e o perfil de potencial de um PQDA de GaAs/AlGaAs, com “spike” de AlGaAs. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos mini-poços e L_b é a espessura do “spike”.

Analogamente ao que ocorre em sistemas de PQS, o perfil de potencial gerado nos PQDAs restringe o movimento dos portadores de carga ao longo da direção de crescimento, z , deixando apenas o plano xy para que estes possam se mover livremente. A resposta do sistema ao confinamento dos portadores é a quantização dos níveis de energia ao longo da direção z .

Uma propriedade fundamental dos PQDAs, e que está relacionada diretamente com a largura do “spike”, é o acoplamento que surge, devido ao efeito de tunelamento, entre as funções de onda dos dois mini-poços; dessa forma, os níveis de energia de cada PQS, que possuíam a mesma energia, se dividem (“split”), e o sistema passa a ter um nível com energia relativamente menor, denominado nível simétrico (E_S), e outro com energia relativamente maior, denominado nível anti-simétrico (E_A)^[40] (Figura 11). Esse “splitting” ocorre para todos os níveis de energia dos PQS quando ocorre o acoplamento entre eles.

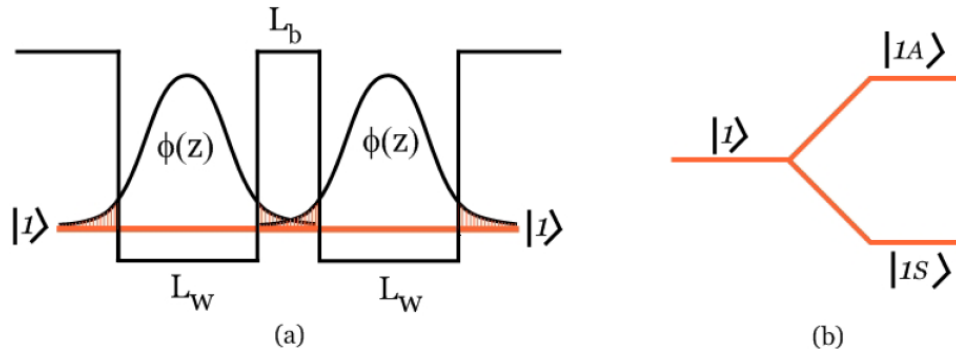


Figura 2 – (a) Representação de uma barreira central suficientemente estreita (“spike”) para que haja interação das funções de onda dos poços quânticos individuais; devido ao efeito de tunelamento, as funções de onda sofrem um “overlap”; (b) Devido ao “overlap” das funções de onda, o nível de energia $|p = I\rangle$ sofre um “splitting”, gerando um nível simétrico, $|p = IS\rangle$, de menor energia, e um nível anti-simétrico, $|p = IA\rangle$, de maior energia.

De forma semelhante à que ocorre nos PQS, as transições nos PQDAs devem obedecer à regra de seleção; contudo, nesse caso, as transições só podem ocorrer de estados simétricos de elétrons para estados simétricos de buracos (pesado e leve), e de estados anti-simétricos de elétrons para anti-simétricos de buracos (pesado e leve). Além disso, é preciso que os estados tenham o mesmo número quântico p (Figura 12) ^[38].

Os potenciais dos poços para elétrons e buracos continuam sendo dados, respectivamente, pelas Equações (8) e (9). A estrutura de bandas do PQDA é mostrada na Figura 12, assim como as transições permitidas entre seus níveis de energia.

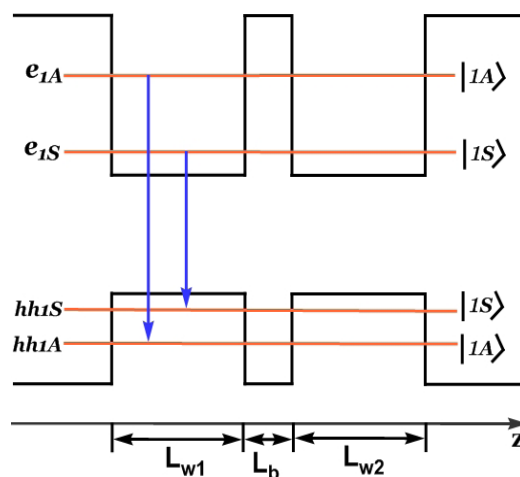


Figura 3 – Representação da estrutura de bandas e dos níveis de energia do PQDA. As transições só podem ocorrer entre os níveis simétrico de elétrons e simétrico de buracos ($e_{IS} \rightarrow hh_{IS}$) ou entre os níveis anti-simétrico de elétrons e anti-simétrico de buracos ($e_{IA} \rightarrow hh_{IA}$).

2.4.1 Níveis de Energia em PQDAs

Em um PQDA, que consiste de dois PQS de largura L_w , separados por uma barreira central (“spike”) de largura L_b (Figura 13), os portadores ficam sujeitos à ação de um potencial $V(z)$ dado por:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{L_b}{2} < |z| < \frac{L_b}{2} + L_w \\ \Delta E_{c(v)} & \text{nas demais regiões} \end{cases} \quad (22)$$

onde os índices c e v denotam o potencial para elétrons e buracos (pesado e leve), respectivamente.

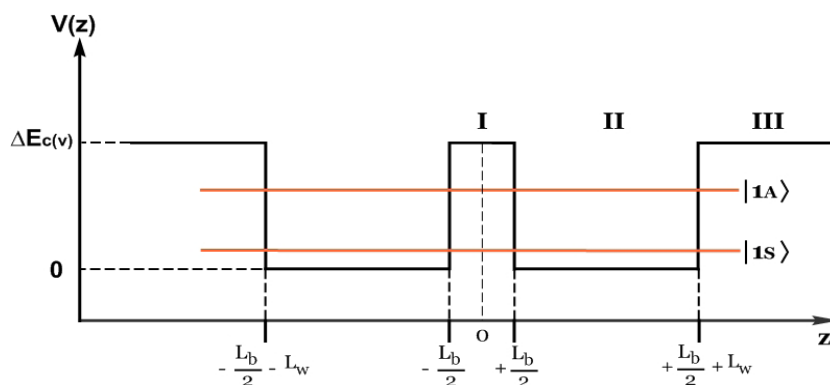


Figura 4 – Representação da estrutura de bandas e dos níveis de energia do PQDA ao longo da direção de crescimento (z).

Na aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano dos portadores ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura, z , é dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (23)$$

onde m^* é a massa efetiva do portador, sendo que na região do poço esta massa é designada por m_w^* e na região das barreiras por m_b^* . As soluções da equação de Schrödinger para as regiões descritas pelo potencial de confinamento podem ser facilmente obtidas. A simetria do

sistema fornece funções de onda com paridade par ou ímpar. As funções de onda para as diferentes regiões da heteroestrutura são dadas por^[41]:

$$\Phi(z) = \begin{cases} C_I [\exp(-\kappa_b z) + \exp(\kappa_b z)] & \text{paridade par} & \text{região I} \\ D_I [\exp(-\kappa_b z) - \exp(\kappa_b z)] & \text{paridade ímpar} & \text{região I} \\ C_{II} \cos[k_w(z-L)] + D_{II} \sin[k_w(z-L)] & & \text{região II} \\ C_{III} \exp(-\kappa_b z) & & \text{região III} \end{cases} \quad (24)$$

onde os C 's e os D 's são constantes a serem determinadas a partir de condições de contorno nas interfaces da heteroestrutura, $L = \frac{1}{2}(L_b + L_w)$. k_w e κ_b são os vetores de onda na região dos poços e das barreiras, respectivamente, e são dados por equações análogas às Equações (14) e (15):

$$k_{we(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(h)}^* E} \quad (25)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E)} \quad (26)$$

A solução exata para o problema do PQDA é obtida através da aplicação das condições de contorno apropriadas nas interfaces poço/barreira, sendo elas:

i) a continuidade das funções:

$$[\phi_I(z)]_{+\frac{L_b}{2}} = [\phi_{II}(z)]_{+\frac{L_b}{2}} \quad (27)$$

e

$$[\phi_{II}(z)]_{+\frac{L_b+L_w}{2}} = [\phi_{III}(z)]_{+\frac{L_b+L_w}{2}} \quad (28)$$

ii) e a conservação do fluxo de partículas:

$$\left[\frac{1}{m_b^*} \frac{d\phi_I(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}} = \left[\frac{1}{m_w^*} \frac{d\phi_{II}(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}} \quad (29)$$

e

$$\left[\frac{1}{m_w^*} \frac{d\phi_{II}(z)}{dz} \right]_{-\frac{L_b}{2}+L_w} = \left[\frac{1}{m_b^*} \frac{d\phi_{III}(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}+L_w} \quad (30)$$

onde os índices *I*, *II* e *III* indicam as regiões da heteroestrutura e as respectivas funções de onda. Procedendo com a aplicação das condições acima, após uma trabalhosa manipulação matemática obtém-se a equação para os auto-estados de energia do PQDA^[42]:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \pm \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) = 0 \quad (31)$$

onde

$$\zeta = \frac{\kappa_b m_w^*}{k_w m_b^*} \quad (32)$$

e os sinais + e – referem-se aos estados com paridade ímpar e paridade par, respectivamente.

A Equação (31) é uma equação transcendental e, por esta razão, suas soluções, isto é, as auto-energias E_p associadas aos estados dos portadores no PQDA, só podem ser obtidas numericamente e/ou graficamente.

Analogamente ao que foi feito para o caso do PQS, os vetores de onda precisam ser transformados quanto à suas dimensões. Como a massa geralmente é dada em *quilogramas* (*Kg*) e a energia em *elétron-volts* (*eV*), é preciso introduzir um fator multiplicativo para que os vetores de onda k_w e κ_b tenham a dimensão correta de m^{-1} . Se \hbar for dado em *elétron-volts vezes segundo* ($eV \times s$) esse fator será:

$$2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \quad (33)$$

Portanto, os vetores de onda podem ser expressos como:

$$k_w (m^{-1}) = 2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_w^* (Kg) E (eV)}}{\hbar (eV \times s)} \quad (34)$$

e

$$\kappa_b(m^{-1}) = 2,498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_b^*(Kg)(\Delta E_{c(v)} - E)(eV)}}{\hbar(eV \times s)} \quad (35)$$

As unidades entre parêntesis são aquelas em que os parâmetros devem estar.

Pode-se notar que os vetores de onda estão expressos em função da energia E . Consequentemente, para se calcular os níveis de energia E_p , deve-se substituir as Equações (34) e (35) na Equação (31) e, então, representar, em um mesmo gráfico, as seguintes expressões:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \quad \textit{versus} \quad E \quad (36)$$

e

$$\mp \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) \quad \textit{versus} \quad E \quad (37)$$

onde $p = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal. Como ambas as expressões são funções apenas de E , a intersecção das curvas fornece o valor do nível de energia E_p em eV .

2.5 ÉXCITONS E EFEITOS DE CONFINAMENTO EM PQS

Os semicondutores intrínsecos, a temperaturas próximas do zero absoluto, têm a banda de valência (BV) preenchida de elétrons e a banda de condução (BC) vazia, ou seja, não há portadores livres. Para que um elétron saia da BV e vá para a BC, é necessário que ele receba de alguma forma uma quantidade de energia igual ou superior à energia de “gap” do material. Quando um semiconductor absorve radiação eletromagnética com energia maior do que a energia de “gap”, um elétron que está na banda de valência é promovido para a banda de condução, deixando um “buraco” na BV. Imediatamente após a absorção, tanto o elétron quanto o “buraco” começam a perder energia emitindo fônons^[30], decaindo assim para o fundo da BC e para o topo da BV. Como o elétron e o buraco têm cargas elétricas opostas, eles sofrem interação coulombiana, semelhante a uma átomo de hidrogênio, isto é, com o buraco e o elétron girando ao redor do centro de massa do sistema. Essa estrutura, denominada *éxciton*, é a chave para a compreensão de muitos fenômenos eletro-ópticos que envolvem a

interação da luz com a matéria, sendo, portanto, de fundamental importância para este trabalho.

2.5.1 Éxcitons em Materiais “Bulk”

Devido ao fato da estrutura excitônica ser similar à de átomos monoelétrônicos, é possível se obter os auto-valores de energia e o raio das órbitas do éxciton (para éxcitons em materiais semicondutores) da mesma forma que se obtém para o átomo de hidrogênio, fazendo apenas algumas modificações no Hamiltoniano do sistema devido ao fato do éxciton encontrar-se imerso em um meio onde a constante dielétrica ε é maior que 1, e não mais no vácuo ($\varepsilon = 1$), e ao fato das massas dos portadores serem dadas por suas massas efetivas nas regiões do poço e das barreiras. Procedendo-se desta maneira^[43,44] é possível encontrar as seguintes equações para o auto-valor de energia do n -ésimo estado, E_n , e para o raio orbital da n -ésima órbita, a_n , do éxciton:

$$E_n = \frac{1}{n^2} \frac{\mu^*}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\varepsilon} \right)^2 \Rightarrow E_n = \frac{1}{n^2} \frac{\mu^*}{m_0 \varepsilon^2} \times R_y \quad (38)$$

e

$$a_n = n^2 \frac{\varepsilon \hbar^2}{e^2 \mu^*} \Rightarrow a_n = n^2 \frac{m_0 \varepsilon}{\mu^*} \times a_B \quad (39)$$

onde n é o número quântico principal, μ^* é a massa efetiva reduzida do éxciton, m_0 é a massa do elétron no vácuo, $R_y = 13.6 \text{ eV}$ é a constante de Rydberg e $a_B = 0.529 \text{ \AA}$ é o raio de Bohr.

A partir dessas duas expressões pode-se obter duas conclusões importantes a respeito do comportamento dos éxcitons em materiais "bulk": *i)* os auto-valores de energia E_n são negativos, o que quer dizer que os auto-estados correspondentes a estes auto-valores de energia são auto-estados ligados do sistema. Isso significa que, para que haja a quebra de um éxciton é necessário fornecer certa quantidade de energia para o par elétron-buraco e *ii)* as expressões para os auto-valores de energia e para o raio das órbitas são as expressões obtidas

para o átomo de hidrogênio no vácuo, porém, corrigidas pelos parâmetros do meio em que o éxciton se encontra, isto é, a massa efetiva reduzida (μ^*) e a constante dielétrica do meio (ϵ).

Como o estado de maior relevância para as transições ópticas à baixas temperaturas é o estado fundamental do éxciton (estado $1s$), as Equações (38) e (39) podem ser reescritas para este estado e, além disso, é conveniente fazer a mudança de notação: $E_1 \rightarrow E_0$ e $a_1 \rightarrow a_0$, portanto:

$$E_1 = E_0 = \frac{\mu^*}{m_0 \epsilon^2} \times R_y \quad (40)$$

e

$$a_1 = a_0 = \frac{m_0 \epsilon}{\mu^*} \times a_B \quad (41)$$

Essas equações fornecem, respectivamente, a energia de ligação excitônica em um material “bulk” e o raio da órbita para o estado de menor energia, estado $1s$.

Contudo, para a obtenção da energia total de um éxciton formado em um material semicondutor “bulk” é necessário levar em consideração o “gap” de energia do material:

$$E_T = E_g + E_{exc} \quad (42)$$

Como a energia de ligação excitônica é negativa ($E_{exc} = -E_0$, Eq. (40)), tem-se:

$$E_T = E_g - E_0 \quad (43)$$

ou seja, os níveis de energia excitônicos formam-se abaixo da banda de condução do material. Na prática isso implica em uma diminuição da energia de emissão do sistema quando há a recombinação do par elétron-buraco.

2.5.2 Éxcitons em PQS

O efeito de confinamento gerado pelos sistemas de poços quânticos provoca duas mudanças importantes e fundamentais nos éxcitons: a diminuição do raio excitônico e o aumento da energia de ligação excitônica. Pelo fato dos poços confinarem os portadores de carga em uma região espacial reduzida, os mesmos encontram-se mais próximos uns dos outros e, por conseguinte, diminuem o raio da interação (raio excitônico) e o volume espacial do éxciton. Em consequência disso, o potencial de interação entre eles (potencial de Coulomb) fica mais intenso, já que este potencial é inversamente proporcional à distância da interação:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e}{r} \quad (44)$$

onde $r = |r_e - r_h|$ é a distância relativa entre o elétron e o buraco. Esse aumento na intensidade do potencial de Coulomb provoca um aumento na energia de ligação excitônica nos poços quânticos (tanto simples quanto duplos).

Em poços quânticos não é tão simples determinar a energia de ligação e o raio excitônico como no caso dos materiais “bulk”. Sistemas de poços quânticos simples e duplos apresentam certo grau de anisotropia, diferentemente do material “bulk”, que é isotrópico. Essa anisotropia, que é gerada pelo confinamento dos portadores (e do próprio éxciton) ao longo da direção de crescimento, faz com que as interações desses portadores, e do éxciton, com o meio sejam diferentes ao longo das diferentes orientações do material. Para resolver o problema da anisotropia, He^[45] propôs a *teoria do espaço dimensional fracionário*. Nessa teoria, as interações anisotrópicas em um espaço 3D são tratadas como isotrópicas em um espaço de dimensão fracionária, sendo a dimensão do sistema, α , determinada pelo grau de anisotropia do sistema. Nesse espaço, o problema do éxciton em poços quânticos torna-se novamente o problema do átomo de hidrogênio, porém não mais em um espaço inteiro, como 2D ou 3D, mas em um espaço de dimensão fracionária α .

De acordo com o modelo de He^[45], a energia e o raio orbital para o estado 1s do éxciton são dados, respectivamente, por:

$$E_{1s} = -\left[\frac{2}{\alpha - 1}\right]^2 E_0 \quad (45)$$

e

$$a_{1s} = -\left[\frac{\alpha - 1}{2}\right]^2 a_0 \quad (46)$$

onde E_0 e a_0 são, respectivamente, o Rydberg efetivo, dado pela Equação (40) e o raio de Bohr efetivo, dado pela Equação (41).

Em poços quânticos reais, o valor de α varia entre 2 e 3. Essa redução da dimensionalidade pode ser explicada pelo seguinte raciocínio: à medida que a largura do poço diminui, aumenta-se o confinamento do éxciton e, por conseguinte, a sua função de onda fica mais comprimida e localizada. A interação de Coulomb entre o par elétron-buraco torna-se, então, anisotrópica e a dimensão do sistema, α , atinge valores menores que 3. Para poços muito estreitos, as funções de onda penetram muito nas barreiras, restaurando parcialmente a tridimensionalidade do sistema e fazendo com que α volte a crescer à medida que a largura do poço diminui. Assim, observa-se que α nunca atingirá o valor 2 (sistema completamente bidimensional), mas alcançará um valor mínimo, a partir do qual a penetração da função de onda na região das barreiras tenderá a restaurar a tridimensionalidade do sistema. Na prática isso significa que não é possível construir-se heteroestruturas com confinamento perfeitamente bidimensional.

Dessa forma, o problema principal consiste em definir a dimensão fracionária, que descreve o grau de anisotropia da interação elétron-buraco para então obter a energia de ligação (e do raio orbital) de um éxciton em um determinado poço quântico.

2.5.3 Dimensionalidade em PQS: O Modelo MLC

A solução do problema da dimensionalidade em PQS foi inicialmente proposta por Mathieu e colab.^[39], que propuseram um modelo analítico para o cálculo da dimensão fracionária α . Segundo os autores, este parâmetro deve estar relacionado com a extensão espacial da interação entre o par elétron-buraco, podendo ser expressa pela seguinte equação:

$$\alpha = 3 - \exp(-\beta) \quad (47)$$

onde $\beta \rightarrow \infty$ corresponde ao caso tridimensional ($\alpha = 3$) e $\beta = 0$ corresponde ao caso bidimensional ($\alpha = 2$). Em poços quânticos reais, o parâmetro β é dado por:

$$\beta = \frac{L_w^*}{2a_0^*} \text{ e, assim: } \alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_w^*}{2a_0^*}\right) \quad (48)$$

onde a_0^* representa o raio do éxciton na hetero estrutura e L_w^* é a largura efetiva do poço quântico, que representa a extensão espacial do movimento dos portadores ao longo da direção de confinamento (z), sendo dada por:

$$L_w^* = \frac{1}{K_b} + L_w + \frac{1}{K_b} \quad (49)$$

onde $1/K_b = 1/k_{be} + 1/k_{bh}$, sendo k_{be} e k_{bh} os vetores de onda dos portadores na região das barreiras (Eq. (15)). A extensão espacial dos portadores, dada pela Equação (49), leva em conta a dimensão do poço quântico, L_w , e a penetração da função de onda excitônica em ambas as barreiras de potencial, $2/K_b$ (Figura 14).

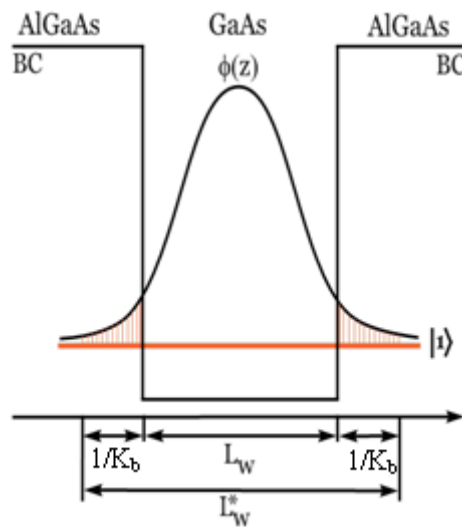


Figura 5 – Esquema da largura efetiva L_w^* em um PQS.

Mathieu e colab.^[39], além de terem proposto uma expressão analítica para o cálculo da dimensionalidade α em poços quânticos, apresentam também algumas correções que devem ser realizadas para que as Equações (45) e (46) forneçam resultados realísticos. Essas correções se devem, por exemplo, à descontinuidade da massa efetiva dos portadores e da constante dielétrica nas interfaces do poço entre outros fatores. A seguir, será apresentada uma síntese das principais correções propostas pelo *modelo MLC*.

2.5.4 Diferença entre a Massa Efetiva dos Portadores nos Materiais da Barreira e do Poço Quântico

Como discutido anteriormente, a função de onda excitônica penetra nas barreiras que formam o poço quântico e, como as massas do elétron e do buraco no material do poço e no da barreira são diferentes, é necessário fazer uma correção na massa efetiva do excíton. Levando –se em conta este descasamento entre massas efetivas dos materiais, Mathieu e colab.^[39] propõem a utilização de dois parâmetros que funcionam como pesos estatísticos, sendo eles:

$$\beta_e = \frac{L_w}{\frac{2}{K_{be}} + L_w} \quad (50)$$

e

$$\beta_h = \frac{L_w}{\frac{2}{K_{bh}} + L_w} \quad (51)$$

onde os subscritos e e h se referem ao elétron e ao buraco, respectivamente. Nessas expressões, a extensão espacial do portador (elétron ou buraco) no poço quântico, dada pela largura física do poço, L_w , é dividida pela extensão espacial total do portador ao longo da direção z , dada por $L_w + 2/K_b$. Dessa forma é possível estimar o efeito que a penetração da função de onda excitônica nas barreiras de potencial tem sobre as massas efetivas (e, também, sobre a constante dielétrica, como veremos mais adiante).

Utilizando esses pesos, os valores médios da massa efetiva do elétron e dos parâmetros da banda de valência podem ser reescritos como^[39]:

$$m_e^* = \beta_e m_{we} + (1 - \beta_e) m_{be} \quad (52)$$

$$\gamma_1^* = \beta_h \gamma_{w1} + (1 - \beta_h) \gamma_{b1} \quad (53)$$

$$\gamma_2^* = \beta_h \gamma_{w2} + (1 - \beta_h) \gamma_{b2} \quad (54)$$

onde γ_1 e γ_2 são os parâmetros de Luttinger, dados por^[38]:

$$\gamma_{1w(b)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{hw(b)}^*} + \frac{1}{m_{lw(b)}^*} \right) m_0 \quad (55)$$

e

$$\gamma_{2w(b)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{lw(b)}^*} + \gamma_{1w(b)} \right) m_0 \quad (56)$$

onde os subscritos w e b se referem às regiões do poço e das barreiras, respectivamente. Dessa maneira, o valor médio do raio de Bohr, a_0^* , que é o comprimento característico da interação de Coulomb pode ser reescrito como:

$$a_0^* = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \frac{m_0}{\mu^*} \times a_B \quad (57)$$

onde μ^* é o valor médio da massa reduzida do éxciton tridimensional, dado por:

$$\frac{1}{\mu^*} \cong \frac{1}{m_e^*} + \gamma_1^* \quad (58)$$

Com essas correções, os parâmetros acima assumem um único valor (um valor médio) para todas as regiões ao longo da direção z da heteroestrutura.

2.5.5 Descasamento da Constante Dielétrica entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico e o Efeito das Cargas Imagem

Considerando a diferença entre as constantes dielétricas do material do poço e das barreiras, há dois efeitos a serem levados em conta: o primeiro deles está relacionado diretamente à porcentagem da função de onda excitônica que penetra nas barreiras de potencial. Como, geralmente, a constante dielétrica do material da barreira é menor do que a do material do poço, há um aumento na energia de ligação excitônica (Equação (40)). O segundo efeito está relacionado com a força e a posição das cargas imagem na heteroestrutura. Ambos os efeitos podem ser incluídos no *modelo MLC* de uma forma analítica, porém, apenas o primeiro será considerado nesse trabalho. Este efeito pode ser levado em conta no cálculo do Rydberg efetivo E_0 e do raio de Bohr a_0 . Para isso, o valor médio de constante dielétrica pode ser definido como:

$$\varepsilon^* = \sqrt{\beta_e \beta_h} \varepsilon_w + (1 - \sqrt{\beta_e \beta_h}) \varepsilon_b \quad (59)$$

onde ε_w e ε_b são, respectivamente, a constante dielétrica dos materiais do poço e das barreiras; β_e e β_h são os pesos estatísticos dados pelas Equações (50) e (51), respectivamente.

2.5.6 Determinação da Energia de Ligação Excitônica

A partir da obtenção do parâmetro α , a energia de ligação excitônica, E_b , pode ser expressa, de uma maneira geral, como^[45]:

$$E_b = \frac{4E_0}{[2n + \alpha - 3]^2} \quad (60)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal e E_0 é dado pela Equação (40). E_0 e α devem ser considerados levando em conta todas as correções para os parâmetros dos quais eles dependem, como, por exemplo, ε^* (constante dielétrica efetiva) e a_0^* (raio de Bohr efetivo).

2.5.7 Dimensionalidade em PQDAs: Extensão do Formalismo MLC para PQDAs

Quando estendemos o modelo de Mathieu e colab.^[39] para um sistema de PQDAs, devemos nos preocupar em como definir o parâmetro de dimensão α . Se considerarmos um sistema de dois poços acoplados como um sistema de um poço simples, de largura efetiva L_{wef} , a Equação (47) pode ser diretamente aplicada para o cálculo do parâmetro α , através da simples substituição de L_w por L_{wef} na Equação (49).

Analisando, os limites do sistema de PQDAs, tem-se que:

$$L_b \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad L_{wef} \rightarrow L_{w1} + L_{w2} \quad (61)$$

$$L_b \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad L_{wef} \rightarrow L_{w1} \text{ ou } L_{wef} \rightarrow L_{w2}$$

No primeiro caso, o sistema evoluirá para um PQS, com largura efetiva dada pela soma das larguras individuais de cada poço que compõe o poço quântico duplo. No segundo caso, quando a barreira é muito espessa (na situação ideal tende ao infinito), o sistema de poços duplos evoluirá para um sistema com dois PQS, e a largura efetiva será ou a largura do primeiro poço, ou a largura do segundo poço, visto que os poços serão não-interagentes.

Baseando-se nos casos limites, Zhao e colab^[33] propuseram a seguinte expressão para o cálculo da largura efetiva de um poço quântico duplo:

$$L_{wef} = L_{w1} + L_{w2} \exp(-L_b K_s) \quad (62)$$

onde L_b é a espessura do “spike”, e o parâmetro K_s representa o vetor característico da penetração do éxciton no “spike”, e é responsável por caracterizar a interação entre os dois poços, sendo dado por^[33]:

$$\frac{1}{K_s} = \frac{1}{\kappa_{se}} + \frac{1}{\kappa_{sh}} \quad (63)$$

onde, para o poço quântico duplo, os parâmetros κ_{se} e κ_{sh} são os vetores de onda do elétron e do buraco na região do “spike”, respectivamente, e são obtidos a partir da Equação (26). Assim, para a obtenção de α para o sistema de poços quânticos duplos, basta substituir L_w por L_{wef} na Equação (49) e efetuar o mesmo procedimento utilizado para o poço simples (Eqs. (47) e (48)).

2.6 MODELOS QUE DESCREVEM A VARIAÇÃO DO “GAP” DE ENERGIA COM A TEMPERATURA

2.6.1 Introdução

Nos materiais semicondutores a dependência do “gap” de energia ou da transição excitônica com a temperatura ($E_g(T)$) é uma característica de suma importância^[46,47]. Os primeiros resultados publicados sobre a variação do “gap” de energia com a temperatura datam de 1930^[48]. Naquele trabalho inicial, embasado nos poucos dados experimentais disponíveis até então, deduziu-se que as energias de “gap” (E_g) eram linearmente dependentes da temperatura^[49,50]. Entretanto, com o advento do transistor os dados experimentais mostraram que dE_g/dT anula-se quando $T \rightarrow 0$ ^[50].

À baixíssimas temperaturas ($T < 10$ K), o comportamento assintótico para $T \rightarrow 0$ é do tipo T^4 . Isto é verificado, empregando-se o modelo de Debye em que o comportamento assintótico previsto (e demonstrado experimentalmente) para o calor específico (a derivada da energia em relação à T) é $\sim T^3$ ^[50,51]. Aumentando –se a temperatura, o comportamento de $E_g(T)$ ainda pode ser representado por uma expressão do tipo T^p , mas com p variando entre 2 e 3,33^[52]. A altas temperaturas o comportamento da energia de “gap” é linear com a temperatura.

Dois mecanismos distintos contribuem para a ocorrência da variação do “gap” de energia em função da temperatura, são eles: a interação elétron-fônon (IEF) e a expansão térmica da rede (ETR)^[24,26,27,29]. Esta dependência pode ser representada pela expressão geral:

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right) = \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_{IEF} + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_{ETR} \quad (64)$$

onde o primeiro termo do segundo membro representa a variação do “gap” com a temperatura a volume constante (contribuição da interação elétron-fônon) e o segundo termo representa a variação do “gap” induzida pela variação do volume (contribuição da expansão térmica).

De modo geral, a contribuição da expansão térmica para a variação de $E_g(T)$ é pequena comparativamente à contribuição da interação elétron-fônon. No caso do GaAs, a contribuição da expansão térmica da rede para a redução total da energia de “gap”, a temperatura ambiente, foi estimada em 21%^[53]. Assim, devido à “pequena” contribuição da dilatação térmica para a variação total de $E_g(T)$, diversos modelos foram propostos considerando apenas o mecanismo de interação elétron-fônon como uma primeira aproximação para o entendimento do comportamento de $E_g(T)$ ^[54,55,56]

Nesta seção faremos uma síntese dos três modelos mais utilizados para a descrição de $E_g(T)$ (sem considerar os efeitos da dilatação térmica) em materiais semicondutores: os modelos de Varshni, de Viña e de Pässler-*p*.

2.6.2 O Modelo de Varshni

Na década de 60, Varshni propôs a primeira expressão analítica para ajustar o “gap” de energia com a temperatura para os materiais semicondutores^[52]. A expressão empírica proposta por Varshni é:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha_{Var} \frac{T^2}{\beta + T} \quad (65)$$

onde $E_g(0)$ é o “gap” de energia à temperatura de 0 K, e α_{Var} e β são coeficientes puramente empíricos a serem obtidos através do ajuste dos dados experimentais. O coeficiente α_{Var} está

relacionado com o $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{dE}{dT}$ e β geralmente é considerado comparável à temperatura de Debye

Θ_D .

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

$$E_g(T) \rightarrow E_g(0) - \frac{\alpha_{Var}}{\beta} T^2 \quad \text{para } T \ll \beta \quad (66)$$

$$E_g(T) \rightarrow E_g(0) - \alpha_{Var}(T - \beta) \quad \text{para } T \gg \beta \quad (67)$$

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

Em regiões de baixa temperatura, o modelo de Varshni gera problemas, por não fornecer ajustes de boa qualidade, apresentando um comportamento assintótico tipo T^2 .

Recentemente verificou-se em binários, em ternários e em heteroestruturas que o modelo de Varshni é inadequado [57, 58, 59, 21, 60, 61,62], pois proporciona resultados sistematicamente superiores às curvas experimentais na região de baixas temperaturas. De acordo com Pässler, o modelo de Varshni é incapaz de fornecer interpretações físicas adequadas para o comportamento da energia de recombinação excitônica com a temperatura^[21].

Os parâmetros obtidos através da equação de Varshni apresentam uma grande divergências, porém este modelo continua sendo utilizado até os dias atuais em virtude, sobretudo, de sua simplicidade.

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

2.6.3 O Modelo de Viña

Em 1984 Viña e colab.^[22] propuseram um modelo semi-empírico para descrever a variação do “gap” de energia com a temperatura, baseado na distribuição estatística de Bose-Einstein. A expressão proposta por Viña é dada por:

$$E_g(T) = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \quad (68)$$

onde $E_g(T = 0) = E_B - a_B$ é o “gap” de energia à $T = 0$ K, a_B descreve a intensidade da interação elétron-fônon óptico e $\Theta_B \equiv \hbar\omega/k_B$ representa a energia média dos fônons na escala de temperatura^[22]. Bons resultados foram obtidos ao ser aplicado o modelo de Viña nos ajustes da variação do “gap” de energia com a temperatura em elementos como Si e Ge, em binários, como o GaAs^[63] e o InP,^[64] em ternários, como o AlGaAs^[60], em quaternários, como o AlGaAsSb^[62] e em heteroestruturas, tais como super-redes (SRs) de InGaAs/InAlAs^[58,60], PQS^[57] e PQDAs^[57].

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

$$E_g(T) \rightarrow E_B - a_B(1 + 2 \exp(-\Theta_B/T)) = E_g(0) - 2a_B \exp(-\Theta_B/T) \text{ para } T \ll \Theta_B \quad (69)$$

Para altas temperaturas, fazendo $2X = \Theta_B/T$ na Equação (69) e estabelecendo a condição $2X \ll 1$, ou seja, $T \gg \Theta_B$, pode-se desenvolver $\exp(2X) = 1 + 2X + 2X^2 + 4X^3/3 + \dots$ (série de Taylor). Considerando até o termo linear na expansão, têm-se:

$$E_g(T) \rightarrow E_B - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} T = E_g(0) - 2 \frac{a_B}{\Theta_B} (T - \Theta_B/2) \text{ para } T \gg \Theta_B \quad (70)$$

Assim, o modelo de Viña também mostra um comportamento *linear* para altas temperaturas, similar ao modelo de Varshni. Comparando a Equação (70) com a Equação (67), nota-se que $\alpha_{Var} \equiv 2a_B/\Theta_B$ e $\beta \equiv \Theta_B/2$.

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

$$\left[\frac{2a_B}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \cong \frac{(2a_B/\Theta_B)T^2}{T + \Theta_B/2} \quad (71)$$

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

A baixas temperaturas o modelo de Viña também apresenta problemas: o ajuste exibe uma curvatura muito suave, desaparecendo por completo para temperaturas inferiores a ~ 50 K. Este comportamento tipo platô do modelo de Viña, se deve ao fato do modelo não considerar os fônons acústicos, que dominam a interação a baixas temperaturas.

2.6.4 O Modelo de Pässler - p

Em 1996 Pässler desenvolveu um novo modelo analítico (modelo *tipo-p*), com quatro parâmetros, para descrever o efeito da variação do “gap” de energia com a temperatura em materiais semicondutores^[23], obtendo a seguinte expressão:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha\Theta}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta}\right)^p} - 1 \right] \quad (72)$$

Nesta expressão $\alpha \equiv S(T) = - (dE/dT)_{T \rightarrow \infty}$ é um parâmetro a ser ajustado e está relacionado à entropia do “gap” de energia para regiões de altas temperaturas, $\Theta \equiv \hbar\omega/k_B$ é o parâmetro de temperatura característica representando a energia efetiva dos fônons $\hbar\omega$ na escala de temperatura^[22,65,66] e o expoente p é o parâmetro que controla a curvatura da

expressão e está associado à função espectral (ou distribuição de frequências)

$$f(\omega) \propto \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^{\nu}, \text{ através da relação } p = \nu + 1.$$

Em estudos realizados posteriormente, Pässler^[54] observou que a tendência quadrática (T^2) relativamente forte no modelo de Varshni e o desaparecimento da dependência com T no modelo de Viña, para a região de baixas temperaturas, estão representando certos limites do comportamento físico real. Essas constatações foram possíveis devido as análises dos resultados publicados por Grilli sobre a dependência da energia do “gap” com a temperatura. Pässler^[23,56] argumenta que a dependência da variação de $E_g(T)$ em materiais semicondutores, para a região de baixas temperaturas, deve ser proporcional a uma lei de potência, do tipo $E_g(T) \propto T^p$, onde o expoente p difere do valor convencional, $p = 2$, inicialmente proposto por Varshni^[20]. Além disso, Pässler^[54] demonstrou que apenas três parâmetros (por exemplo: $E_g(T = 0)$, α_{Var} e β do modelo de Varshni) são insuficientes para uma descrição adequada da curva experimental de $E_g(T)$.

A aplicação do modelo de Pässler *tipo-p* à uma grande variedade de materiais semicondutores, obteve excelentes resultados, como por exemplo em compostos elementares, como o Si^[65], em binários, como o CdS^[23] e o GaAs^[54], em ternários, como o AlGaAs^[60], em quaternários, como o AlGaAsSb^[62] e, também, à heteroestruturas, tais como SRs de InGaAs/InAlAs^[58,61], PQS^[57] e PQDAs^[57], fornecendo melhores ajustes para os conjuntos de dados experimentais de $E_g(T)$, com a variância do ajuste de mínimo-quadrado (S^2) significativamente menor do que aqueles associados aos modelos empíricos de Varshni e semi-empírico de Viña.

Entretando, a definição sobre o melhor modelo para o ajuste de $E_g(T)$ ainda esta sem resposta. A Equação (72), apesar de fornecer excelentes resultados em relação aos modelos de Viña e, principalmente, de Varshni, e de ter uma estrutura analítica relativamente simples, não consegue distinguir as contribuições dos fônons dos diferentes ramos para a variação de $E_g(T)$, não proporcionando bons ajustes para os parâmetros Θ e p em materiais onde o parâmetro p é maior que 3. Este comportamento ($p > 3$) surge em semicondutores de “gap” grande, como SiC e GaN^[54], poços quânticos estreitos ($L_w < 30 \text{ \AA}$) e em estruturas de SRs de período curto. Pensando nisso Pässler, em 1998, propôs uma nova expressão para ajustar os casos onde $p > 3$ e que fosse ao mesmo tempo capaz de estimar a contribuição dos fônons dos diferentes ramos (acústicos e ópticos), conhecida como modelo de Pässler *tipo- ρ* ^[56,67], o qual, apesar de fornecer bons ajustes, não tem sido muito utilizado devido à maior complexidade na análise de seus parâmetros.

Neste trabalho os modelos de Viña e Pässler *tipo-p*, os quais são modelos relativamente simples e que fornece bons resultados, serão empregado com objetivo de se investigar a influência da espessura do “spike” no comportamento das transições excitônicas em heteroestruturas de PQDAs de GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Mais detalhes sobre a utilização deste modelo, assim como os resultados obtidos, serão discutidos no item 5.6.

3 ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO

3.1 INTRODUÇÃO

As técnicas de espectroscopia de modulação têm sido amplamente utilizadas na caracterização de materiais semicondutores desde a proposta a técnica de eletrorefletância em 1964^[68] e tiveram um grande impulso com o surgimento de outras técnicas de modulação no final dos anos sessenta e início dos setenta, como a refletância diferencial, a termorefletância, a magnetorefletância e a fotorefletância^[68]. Estas técnicas foram e algumas ainda continuam sendo, bastante empregadas na caracterização de materiais tipo “bulk”; e chamam a atenção principalmente devido ao seu caráter derivativo, de modo que, provocando pequenas mudanças nas propriedades da amostra analisada, produzem-se variações significativas do sinal em determinados pontos da estrutura de bandas de energia do material, os quais possuem singularidades na densidade conjunta de estados, suprimindo efeitos de “background” sem interesse. Com isso, estruturas espectrais pouco definidas que não poderiam ser observadas num espectro absoluto, como por exemplo, de refletância, são geralmente realçados num espectro de eletrorefletância ou fotorefletância. Isto, em alguns casos, dispensa o uso de equipamentos criogênicos, essenciais em algumas outras técnicas como, por exemplo, a fotoluminescência. Além destas vantagens, soma-se se ainda o baixo custo e facilidade de implementação dessas técnicas.

O aspecto relevante nas técnicas de espectroscopia de modulação é a interpretação das mudanças no espectro óptico de uma amostra, provocada pela modulação periódica de algum parâmetro físico da amostra. No caso da eletrorefletância e fotorefletância a perturbação ocorre através da modulação do campo elétrico interno.

3.2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS DA FOTOREFLETÂNCIA E ELETRORREFLETÂNCIA

3.2.1 Princípios Físicos da Fotorefletância e Eletrorefletância

As técnicas de espectroscopia de modulação, como em PR e ER, se baseiam na resposta de um material à excitação por luz (radiação eletromagnética de energia $E = \hbar\omega$) que pode ser descrita pelas variações na sua função dielétrica $\epsilon(E) = \epsilon_1(E) + i\epsilon_2(E)$. A parte imaginária da função dielétrica é diretamente proporcional ao coeficiente de absorção $\alpha(E)$, o qual é definido a partir da densidade conjunta de estados das bandas de valência (BV) e de condução (BC) do material. Absorção óptica interbanda é a transição de um elétron da BV para BC. Este processo pode ocorrer quando a energia $\hbar\omega$ da energia de excitação é igual ou maior que o “gap” (E_g) do material. As transições interbandas provocam variações na função ϵ , e ocorrem sempre em determinados pontos da estrutura de bandas de energia do material, conhecidos como pontos críticos ou singularidades de Van Hove^[69].

Através do eletromagnetismo é possível mostrar que a refletância R de um material é uma função das partes real e imaginária da função dielétrica, de modo que uma medida da refletância de uma amostra, em função da energia da radiação incidente, deve exibir as variações em ϵ provocadas pelas transições ópticas que ocorrem nos diversos pontos críticos. Tal procedimento pode ser usado no intuito de se investigar a estrutura de bandas do material sob análise. Tais variações, contudo, nem sempre são abruptas e isoladas, causando ambigüidades na identificação das transições.

Objetivando tornar mais nítidas as variações no espectro óptico foram desenvolvidas técnicas espectroscópicas nas quais se introduz uma perturbação periódica do sistema, sendo o espectro resultante da medida proporcional a alguma derivada do espectro obtido sem a perturbação^[70].

A variação relativa da refletância ($\Delta R/R$), para regime de campo baixo, $\Gamma \gg \hbar\Theta$, onde Γ é o parâmetro de alargamento (relacionado ao tempo de vida do estado) e $\hbar\Theta$ é energia elétro-óptica, pode ser relacionada diretamente com a mudança na função dielétrica ($\Delta\epsilon$) provocada pela perturbação, através da equação^[71]:

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re}[C e^{i\theta} \Delta \varepsilon] \quad (73)$$

onde $\Delta \varepsilon = \varepsilon(E, \xi) - \varepsilon(E, 0)$, onde ξ é o agente perturbativo, que pode ser: pulsos de calor, tensões, campo elétrico e campo magnético, modulados a uma frequência fixa.

Na técnica de espectroscopia óptica conhecida como eletromodulação, a perturbação acontece devido a um campo elétrico. Quando o campo modulado é diretamente aplicado sobre o material, através de contatos elétricos instalados na amostra e ligados a uma fonte de tensão alternada, estamos lidando com eletrorefletância (ER). Contudo, quando o campo elétrico interno à amostra, existente na região de superfície ou em alguma interface da amostra, é modulado por um feixe de luz pulsado a uma frequência fixa (geralmente um feixe de “laser” que passa por um “chopper”), a técnica é conhecida como fotorefletância (PR). Um espectro de eletro ou fotorefletância é um gráfico da intensidade da variação relativa da refletância $\Delta R / R$ (onde R é a refletância da amostra e ΔR é a variação da mesma devido a perturbação) em função da energia dos fótons de um feixe de prova, o qual pode ser obtido através de uma lâmpada de luz branca dispersa por um monocromador.

A eletromodulação (eletrorefletância e fotorefletância) pode ser tratada sob o mesmo aspecto, ou seja, a influência de um campo elétrico sobre os portadores (elétrons e buracos) em um semicondutor.

3.2.2 A Variação da Função Dielétrica Provocada por uma Perturbação ξ

Quando uma perturbação ξ é aplicada sobre um material, ocorrem mudanças na função dielétrica proporcionais à intensidade da perturbação. Se essa intensidade é baixa, as variações da função dielétrica são pequenas, e alteram os parâmetros do material por quantidades pequenas. Os parâmetros dos quais dependem a função dielétrica são a energia de transição (E_0), o tempo de vida do estado (Γ) e o elemento de matriz da transição associado à intensidade (I) da transição. Desde que essas variações sejam pequenas, de modo que:

$$\begin{aligned}
 E_0 &\rightarrow E_0 + \delta E_0 \\
 \Gamma &\rightarrow \Gamma + \delta \Gamma \\
 I &\rightarrow I + \delta I
 \end{aligned}
 \tag{74}$$

onde $\delta E_0 \rightarrow 0$, $\delta \Gamma \rightarrow 0$ e $\delta I \rightarrow 0$, as variações em ξ também serão pequenas, e através das expansões em série de Taylor que podem ser truncadas em primeira ordem, elas podem ser aproximadas por primeiras derivadas desses parâmetros com relação ao agente perturbativo:

$$\Delta \varepsilon = \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial E_0} \frac{\partial E_0}{\partial \xi} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial I} \frac{\partial I}{\partial \xi} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial \xi} \right] \Delta \xi
 \tag{75}$$

Esta aproximação de primeira derivada para $\Delta \varepsilon$ é particularmente adequada para as formas de perturbação que preservam a simetria translacional do sistema. Veremos em seguida que tal simetria é perdida quando a perturbação é um campo elétrico agindo sobre os portadores livres nas bandas de energia.

3.2.3 Efeitos de Campo Elétrico Aplicados a um Semicondutor

Aplicando um campo elétrico de intensidade constante em um material semiconductor, é adicionada uma energia potencial $q\Phi(z)$ (onde $\Phi(z)$ é o potencial elétrico associado a este campo). $\Phi(z)$ aumenta linearmente na direção do campo aplicado (z), “entortando” as bandas de energia nesta direção (Figura15).

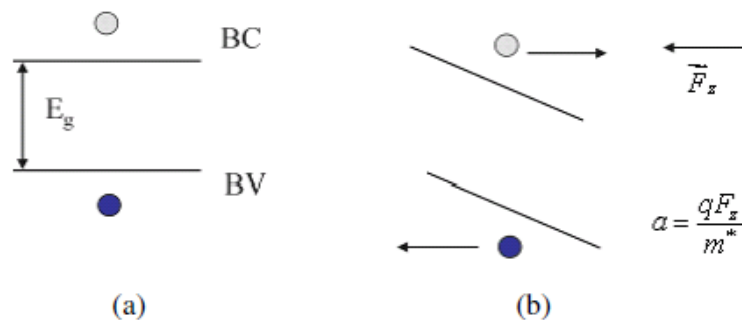


Figura 6 – Esquema idealizado das bandas de energia de um material (a) sem campo elétrico aplicado e (b) com campo elétrico aplicado na direção z (para a esquerda).

Os portadores (elétrons na BC e/ou buracos na BV) serão acelerados dentro das bandas por $a = \frac{qF_z}{m^*}$, onde q é carga do portador, sendo negativo para elétrons e positivo para buracos leves e pesados, m^* é a massa efetiva do portador no material e F_z é o campo elétrico aplicado. A energia potencial criada pelo campo é transformada em energia cinética para os portadores, provocando uma aceleração destes na direção z , devida à aplicação de \vec{F}_z , o que quebra a simetria translacional do sistema nesta direção.

Em geral, há um campo elétrico interno ($\vec{F}_{d.c.}$) criado pela distribuição de cargas em estados de superfície, e/ou na região de carga espacial formada na interface entre materiais semicondutores. Na fotorefletância, como já mencionamos, o campo $\vec{F}_{d.c.}$ é modulado pelo feixe de laser pulsado a uma frequência fixa, cuja energia é maior que a energia E_g do material analisado. Os elétrons e buracos fotogerados pelo laser se separam espacialmente devido ao campo elétrico interno, criando um novo campo elétrico de sentido contrário a $\vec{F}_{d.c.}$, atenuando-o. Assim, na fotorefletância, a modulação ocorre entre $\vec{F}_{d.c.}$ e $\vec{F}_{d.c.} - \vec{F}_z$, onde \vec{F}_z é o campo elétrico criado pela separação espacial dos portadores fotogerados. Já na eletrofletância o campo elétrico externo \vec{F}_z é aplicado diretamente sobre o material através de contatos elétricos instalados sobre a amostra e ligados a uma fonte de alta tensão alternada, modulando diretamente o campo elétrico interno $\vec{F}_{d.c.}$. Assim, na eletrofletância, a modulação ocorre entre $\vec{F}_{d.c.} + \vec{F}_z$ e $\vec{F}_{d.c.} - \vec{F}_z$.

3.2.4 Formas de Linha

Existem três regimes de campo elétrico total atuando na amostra em espectros de eletromodulação de semicondutores “bulk”: baixo, intermediário e alto. A seguir abordaremos os dois primeiros.

3.2.4.1 Regime de campo baixo

No regime de campo baixo, a energia el tro- ptica, Aspnes^[70] demonstrou que:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(E, \vec{F}) - \varepsilon(E, 0) = \frac{e^2 \hbar^2 F^2}{24\mu} \frac{1}{E^2} \frac{\partial^3}{\partial E^3} [E^2 \varepsilon(E, 0)] \quad (76)$$

onde E   a energia do f ton incidente. A varia o da fun o diel trica provocada por um campo el trico, no limite em que $\Gamma \gg \hbar\Theta$ (campo baixo),   proporcional   terceira derivada da fun o diel trica n o perturbada. Este car ter de terceira derivada dos espectros de eletromodula o foi corroborado pela compara o de formas de linha de terceira derivada das partes real e imagin ria da fun o diel trica, obtidas por elipsometria e medidas de eletroreflet ncia em Ge.

Aspnes^[72] demonstrou que, desprezando a intera o excit nica entre o par el tron-buraco e utilizando a descri o do el tron independente e a aproxima o de banda parab lica na vizinhan a de pontos cr ticos da densidade conjunta de estados em semicondutores “bulk”, a fun o diel trica tem a forma geral:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = A\Gamma^{-m} e^{i\phi} (E - E_0 + i\Gamma)^m \quad (77)$$

onde A est  relacionado com o elemento de matriz da transi o  tica, ϕ   um fator de fase ligado ao tipo de ponto cr tico da estrutura de bandas, E_0   a energia da transi o (igual   E_g quando nos referimos ao “gap” fundamental do material), e m   o expoente que depende da dimensionalidade do ponto cr tico, sendo igual a $-1/2$, 0 e $1/2$ para pontos cr ticos em uma, duas e tr s dimens es, respectivamente. O par metro Γ   inversamente proporcional ao tempo de vida do estado.

Devido   Equa o (73) e   forma geral da fun o diel trica dada em (77), formas de linha de eletromodula o (eletroreflet ncia e fotoreflet ncia), obtidas de sistemas onde a condi o de campo baixo   v lida, podem ser ajustados pela rela o^[71]:

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re}[C e^{i\varphi} (E - E_g + i\Gamma)^{-n}] \quad (78)$$

onde C é a amplitude, φ é a fase, E_g é a energia da transição, Γ é a largura de linha e n vale 7/2, 3 e 5/2 para pontos críticos em uma, duas e três dimensões, respectivamente. O espectro é ajustado como um todo através de ajustes independentes sobre as estruturas resultantes das transições ópticas^[70].

3.2.4.2 Regime de campo intermediário e o efeito Franz - Keldysh

No regime de campo intermediário, $\Gamma \ll \hbar\Theta$ e o problema pode ser tratado através da aproximação de massa efetiva, na vizinhança de pontos críticos. A expressão geral para a variação da função dielétrica total na presença do campo elétrico externo é^[70]:

$$\Delta\varepsilon(E, \vec{F}) = \frac{2e^2 \hbar^2 |\hat{e} \cdot P_{cv}|}{m^2 E^2} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\hbar\Theta)^{1/2} [G(\eta) + iF(\eta)] \quad (79)$$

onde \hat{e} é o versor na direção de polarização, P_{CV} é o elemento de matriz do momento eletrônico, E é a energia do fóton, μ é a massa efetiva interbandas, $\hbar\Theta$ é a energia eletro-óptica definida na Equação (83), $F(\eta)$ e $G(\eta)$ são as funções eletro-ópticas e são dadas em termos de funções de Airy^[73] e suas derivadas:

$$F(\eta) = \frac{N^2}{\pi} [Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)] - (\eta)^{1/2} u(-\eta) \quad (80)$$

$$G(\eta) = \frac{N^2}{\pi} [Ai'(\eta)Bi' - \eta Ai(\eta)Bi(\eta)] - (\eta)^{1/2} u(\eta) \quad (81)$$

onde $\eta = (E_g - E)/\hbar\Theta$ e $u(\eta)$ é zero para $\eta < 0$ e 1 para $\eta > 0$ (função de Heavside). Este tratamento mostra uma cauda exponencial abaixo do “gap” e uma série de oscilações amortecidas acima dele, comportamento característico das funções eletro-ópticas (Figura 16).

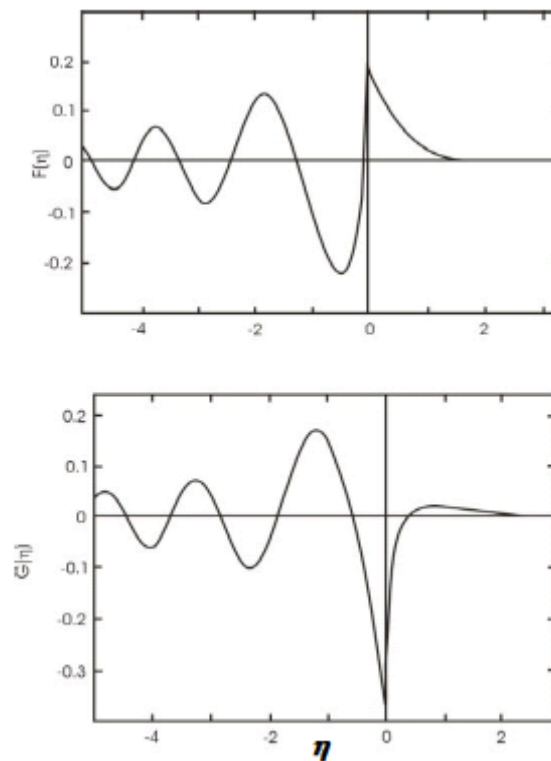


Figura 7 – Comportamento das funções eletro-ópticas em função de $\eta = (E_g - E)/\hbar\Theta$. Podemos observar que estas funções têm uma forte singularidade em $\hbar\omega = E_g$ e exibem um comportamento oscilatório envolvido por uma função de decaimento exponencial para $E_g - E < 0$ (energias maiores que o “gap”) e decaem exponencialmente para $E_g - E > 0$ (energias menores que o “gap”).

Conforme a Equação (73), $\Delta R/R$ está diretamente ligado a $\Delta\varepsilon$; assim, um espectro de eletromodulação seria caracterizado por uma cauda exponencial para energias abaixo de E_g , e oscilações exponencialmente amortecidas para energias maiores que E_g . Este é o efeito Franz-Keldysh, resultado da interação dos portadores com o campo elétrico interno do material. As oscilações observadas para energias maiores do que o “gap” são denominadas oscilações Franz-Keldysh (OFKs) e representam a interferência construtiva das funções de onda dos elétrons e buracos. A cauda exponencial de $F(\eta)$ resulta das penetrações das funções de onda dos elétrons e buracos na região do “gap” de energia do sólido e, neste caso, a probabilidade de ocorrer transições para energias menores do que o “gap” é diferente de zero.

Aspnes e Studna^[74], utilizando a forma assintótica das funções eletro-ópticas alargadas na vizinhança de um ponto crítico do tipo M_0 , obtiveram uma expressão para a forma de linha (isto é, a curva experimental $\Delta R/R$ em função da energia do feixe de prova):

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{C}{(E - E_g)^{(d+1)/4}} \exp\left[-2\Gamma \frac{(E - E_g)^{1/2}}{(\hbar\Theta)^{3/2}}\right] \cos\left[\frac{4}{3} \frac{(E - E_g)^{3/2}}{(\hbar\Theta)^{3/2}} - \frac{\pi}{4}(d-1)\right] \quad (82)$$

onde d é a dimensionalidade do ponto crítico, e

$$\hbar\Theta = \left(\frac{\hbar^2 e^2 F^2}{2\mu}\right)^{1/3} \quad (83)$$

é a energia eletro-óptica e μ é a massa efetiva reduzida do material na direção do campo \vec{F} .

A equação (82) caracteriza uma forma de linha que oscila com a função coseno, amortecida por uma função de decaimento exponencial. Essa é a forma esperada para a variação da função dielétrica devido ao efeito Franz-Keldysh, o que é uma evidência inconfundível do regime de campo intermediário.

3.2.5 Efeitos Excitônicos

Em determinadas situações, dependendo da amostra analisada (grau de pureza, concentração de dopantes, etc.) e das condições de realização da medida (por ex., em baixas temperaturas), os efeitos excitônicos podem ser importantes e até mesmo predominantes no espectro de absorção dos materiais. Entretanto os cálculos realizados nas seções anteriores para as variações da função dielétrica devido à perturbação, não levaram em consideração a interação coulombiana entre o par elétron-buraco.

No experimento de eletromodulação, sendo o campo elétrico seja aplicado na direção do crescimento da amostra, ou seja, perpendicular à sua superfície, os portadores estarão confinados na direção do campo e, portanto, não podem ser acelerados como no caso “bulk”.

Em estruturas semicondutoras contendo poços quânticos isolados, os portadores ocupam os níveis de energia discretos formados pelo potencial do poço; e que além disso, sabemos que os efeitos excitônicos se tornam muito mais relevantes em estruturas de poços quânticos do que no caso “bulk”, devido a confinamento do elétron e do buraco na mesma região espacial^[75]. Contudo, podemos prever que a energia de ligação do éxciton (E_{exc}), tempo de recombinação excitônico (Γ), e também a superposição das funções de onda

do elétron do buraco (relacionados à intensidade de absorção excitônica (I_{exc}) sejam afetados pelo campo elétrico, e desde que a intensidade do campo seja baixa, a variação $\Delta\varepsilon$ poderia ser dada pela Equação (75) onde $\xi = F$, ou seja, o agente perturbado é o campo elétrico.

Pollak e colaboradores^[76] realizaram uma análise de forma de linha de PR em poços quânticos de AlGaAs/GaAs. Através desse estudo, observou-se que, para temperaturas muito baixas (em torno de 6 K), a expressão para a variação na função dielétrica $\Delta\varepsilon$ usando ε da forma lorentziana

$$\varepsilon(E, \Gamma) = \frac{A\Gamma e^{i\phi}}{E - E_0 + i\Gamma} \quad (86)$$

ou seja, a Equação (77) com $m = -1$, ajustou muito bem a curva experimental. Contudo, tal ajuste não forneceu bons resultados para temperaturas elevadas. Para $T = 150$ K, por exemplo, um ajuste com ε tendo uma forma gaussiana se torna mais eficiente.

Entretanto, para $T = 150$ K^[77], verificou-se que a forma de linha da Equação (78) utilizando $n = 3$ (ponto crítico bidimensional) ajusta bem os dados experimentais. Isto pode ser consequência da forma de degrau da curva de absorção de poços quânticos, que é característica de pontos críticos de tipo M_0 -2D. Tal forma de linha (Equação (78) com $n = 3$) imita a forma de linha de primeira derivada de ε com perfil gaussiano. Para todas as temperaturas analisadas neste estudo, verifica-se que todos os ajustes realizados (utilizando formas de linha de primeira derivada de lorentziana, primeira derivada de gaussiana ou terceira derivada de M_0 -2D) fornecem valores idênticos para as energias de transição.

Sintetizando, formas de linha utilizando a Equação (78) parecem fornecer valores confiáveis para as energias das transições ópticas, os quais podem ser comparados com valores teóricos. O mesmo pode ser dito de formas de linha de primeira derivada com ε de perfil gaussiano (para altas temperaturas) e com ε de perfil lorentziano (para baixas temperaturas). Contudo, a Equação (78) provém da possibilidade de aceleração dos portadores pelo campo elétrico, efeito que não se verifica se os portadores estão devidamente confinados no poço de potencial; assim, a forma de linha de primeira derivada com ε gaussiano é, dessa maneira, quase que totalmente empírica.

Aspnes^[78] mostrou que, quando a linha de absorção excitônica é estreita e bem separada do contínuo de absorção da banda, sua contribuição à função dielétrica pode ser obtida da Equação (77) com $m = -1$. Isto leva a formas de linha dadas pela Equação (78) com

$n = 2$ ^[79]. Trabalhos recentes também utilizam $n = 2$ para o ajuste de espectros onde existam transições excitônicas^[80] e, portanto, este será o valor adotado para nossos ajustes tanto de PR como de CER.

4 AMOSTRAS E TÉCNICAS EXPERIMENTAIS

4.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada uma descrição das amostras estudadas neste trabalho e das técnicas espectroscópicas utilizadas para a caracterização óptica das mesmas.

O conjunto de amostras é composto por duas amostras, cada uma contendo duas heteroestruturas diferentes formadas por poços (ou mini-poços) de GaAs e barreiras e “spikes” (barreira interna entre os dois mini - poços no PQDA) de $Al_xGa_{1-x}As$. As duas amostras contêm a mesma concentração de alumínio ($x = 0,15$), sendo que para cada uma delas os PQDAs apresentam “spikes” de espessura variável (5, 15 e 30 Å). Dessa forma, para uma determinada heteroestrutura, pode-se realizar o estudo dos efeitos da espessura do “spike” nas propriedades ópticas das heteroestruturas.

Para o estudo das propriedades ópticas das amostras em questão, foram realizadas medidas de fotorefletância (PR) em função da temperatura e, também, medidas de eletrorefletância sem contato, (CER) (do inglês “Contactless Electro – Reflectance”) em função da temperatura. Há de se destacar que desenvolvemos em sua totalidade a montagem de CER, a qual foi utilizada pela primeira vez no Laboratório de Óptica e Optoeletrônica do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina (UEL). A seguir serão apresentados os detalhes das amostras e os sistemas experimentais das técnicas espectroscópicas utilizadas neste trabalho.

4.2 AMOSTRAS

A Figura 17 ilustra o esquema de crescimento das duas amostras estudadas neste trabalho. A seguir serão apresentados os detalhes das amostras.

A amostra #8 é composta por um PQS de 80 Å de espessura e um PQDA com mini-poços de 40 Å de largura e “spike” de 15 Å de espessura. O crescimento dessa amostra foi realizado da seguinte maneira: sobre um substrato de GaAs, orientado na direção (001), foi crescida uma camada “buffer” de GaAs de 5000 Å. Sobre essa camada “buffer” foi

crescida uma camada de 1000 Å da liga ternária $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$. Em seguida foi crescida a estrutura de PQS, ou seja, foi crescida uma camada de GaAs de 80 Å de espessura e outra camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 300 Å de espessura. Sobre a liga ternária foi crescida a estrutura de PQDA, ou seja, foi crescida uma camada de GaAs de 40 Å de espessura (primeiro mini-poço), uma camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 15 Å de espessura (“spike”), outra camada de GaAs de 40 Å de espessura (segundo mini-poço) e outra camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 300 Å de espessura. Para finalizar a amostra, foi crescida uma camada tampão (“cap-layer”) de GaAs de 50 Å de espessura.

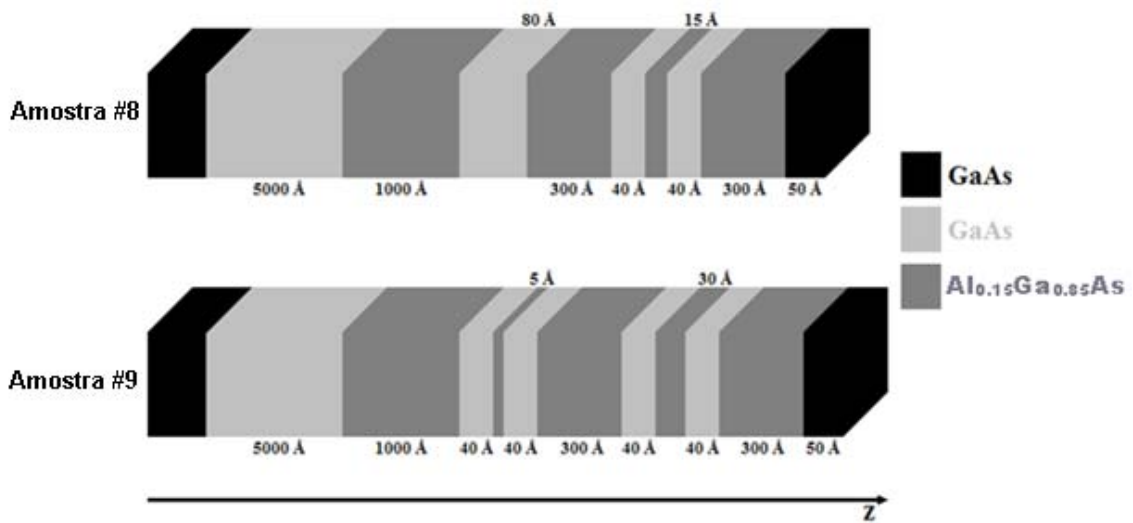


Figura 8 – Esquema de crescimento dos dois tipos de amostras disponíveis para a realização do trabalho.

A amostra #9 é composta por dois PQDAs, um com “spike” de 5 Å de espessura e outro com “spike” de 30 Å de espessura. Ambos os PQDAs são formados por mini-poços de 40 Å de largura. O crescimento das amostras desse tipo foi realizado da seguinte maneira: sobre um substrato de GaAs, orientado na direção (001), foi crescida uma camada “buffer” de GaAs de 5000 Å. Sobre essa camada “buffer” foi crescida uma camada de 1000 Å da liga ternária $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$. Em seguida foi crescida a primeira estrutura de PQDA, ou seja, foi crescida uma camada de GaAs de 40 Å de espessura (primeiro mini-poço), uma camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 5 Å de espessura (“spike”), outra camada de GaAs de 40 Å de espessura (segundo mini-poço) e outra camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 300 Å de espessura. Sobre a liga ternária foi crescida a segunda estrutura de PQDA, ou seja, foi crescida uma camada de GaAs de 40 Å de espessura (primeiro mini-poço), uma camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 30 Å de espessura (“spike”), outra camada de GaAs de 40 Å de espessura (segundo mini-

poço) e outra camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ de 300 Å de espessura. Para finalizar a amostra, foi crescida uma camada tampão (“cap-layer”) de GaAs de 50 Å de espessura.

As amostras foram crescidas através da técnica de MBE no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) do Instituto de Física da USP-SP pelo Prof. Dr. Alain André Quivy e pelo Dr. Tomás Erikson Lamas.

4.2.1 Parâmetros dos Materiais das Amostras

Neste item iremos reapresentar, resumidamente, alguns parâmetros importantes para nossas amostras. Esses parâmetros serão utilizados para calcular teoricamente outras grandezas, como, por exemplo, os níveis de energia nos PQS e PQDAs.

Os parâmetros de entrada para os materiais GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ são mostrados na Tabela 1^[33]. Em alguns casos, como para o cálculo da energia de ligação excitônica (E_B), esses parâmetros devem ser corrigidos segundo as sugestões de Mathieu e colab.^[39], apresentadas no item 2.5.

Tabela 1 – Parâmetros dos materiais GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ^[33].

Parâmetro	GaAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
m_e^*	$0,0667 m_0$	$(0,0667 + 0,083x) m_0$
m_{hh}^*	$0,34 m_0$	$(0,34 + 0,42x) m_0$
m_{lh}^*	$0,094 m_0$	$(0,094 + 0,043x) m_0$
ε	12,5	$12,5(1 - x) + 9,8x$

Além desses parâmetros, consideraremos que a diferença entre o “gap” de energia do GaAs e do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é dada (em meV)^[33] por:

$$\Delta E(x) = 1,455x \quad (87)$$

e que os “off-sets” da banda de condução (ΔE_c) e da banda de valência (ΔE_v) são dados, respectivamente, por^[33]:

$$\Delta E_c(x) = 0,65\Delta E(x) \quad (88)$$

e

$$\Delta E_v(x) = 0,35\Delta E(x) \quad (89)$$

onde x é a concentração de alumínio do material da barreira, ε é a constante dielétrica, e m_e^* , m_{hh}^* e m_{lh}^* são as massas efetivas do elétron, do buraco pesado e do buraco leve, respectivamente.

4.3 A TÉCNICA DE FOTOREFLETÂNCIA

4.3.1 Sistema Experimental de Fotorefletância

O esquema do sistema de PR mostrado na Figura 18 corresponde à montagem existente nos Laboratório de Óptica e Optoeletrônica do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina (UEL) onde foram realizadas as medidas de fotorefletância das amostras estudadas neste trabalho. A seguir são apresentados os detalhes dessa montagem experimental.

A luz branca fornecida pela lâmpada de tungstênio-halogênio (12 V / 60 W) após passar por duas lentes (2) e (3) é focalizada na fenda de entrada (com abertura de aproximadamente 200 μm) de um espectrômetro (Jarrell-Ash de 0,5 m). A luz proveniente da fenda de entrada incide na grade de difração. Um motor de passo, controlado eletronicamente pelo sistema de aquisição de dados, move a grade de difração (600 linhas/mm, com “blaze” em 12000 Å), a qual faz uma varredura em comprimento de onda do feixe monocromático que sai do espectrômetro.

Após sair do espectrômetro, o feixe monocromático passa através de um filtro RG 715 (Schott), não mostrado na figura, o qual não permite a passagem de ordens indesejadas de comprimentos de onda. O feixe passa, então, através de uma lente (5),

escolhida de maneira a otimizar a dimensões do mesmo para uma boa focalização sobre a superfície da amostra, que se encontra fixa em um porta - amostras no interior de um criostato, o qual é acoplado a um sistema de vácuo (composto por uma bomba mecânica e uma bomba turbo-molecular) que permite atingir pressões da ordem de 10^{-6} Torr. Esta pressão é necessária para que o sistema de ciclo fechado de hélio possibilite a obtenção de baixas temperaturas, permitindo, no nosso caso, que a temperatura da amostra possa ser variada através de um controlador de temperatura (modelo 331 – LakeShore) desde 12 até 300 K.

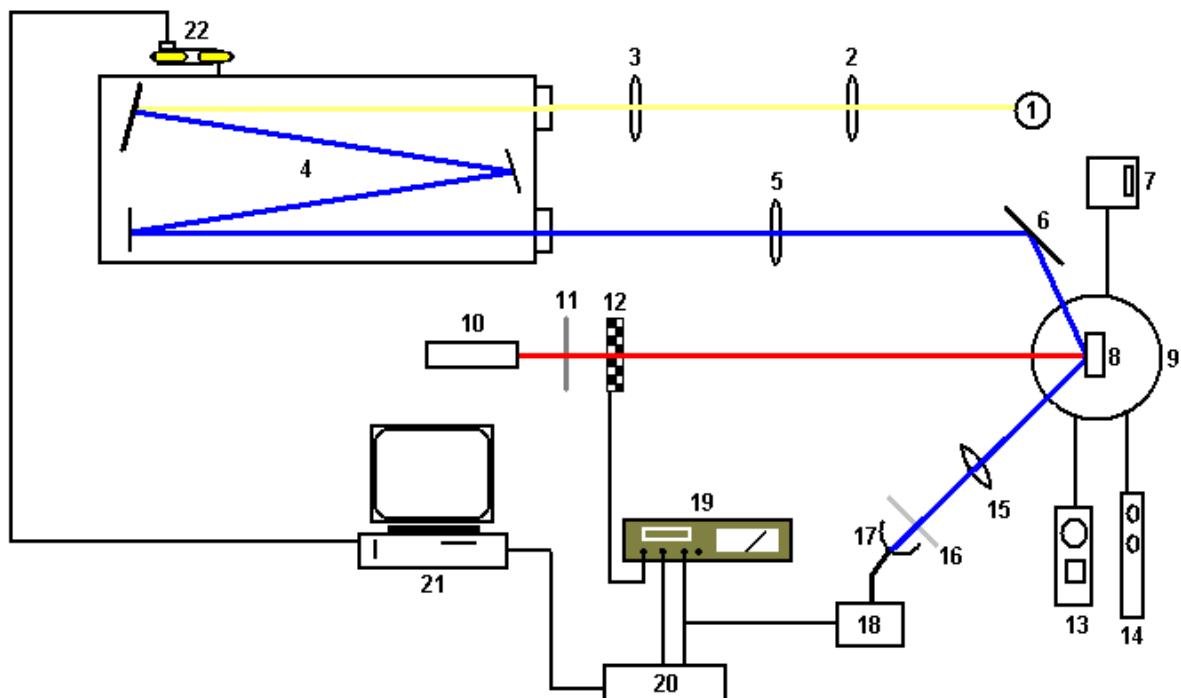


Figura 9 – Esquema da montagem experimental utilizada na obtenção dos espectros de fotorefletância: 1 - Lâmpada, 2 - Lente $f = 11,5$ cm, 3 - Lente $f = 21,0$ cm, 4 - Espectrômetro, 5 - Lente $f = 10,5$ cm, 6 - Espelho, 7 - Sistema de controle de temperatura, 8 - Amostra, 9 -Criostato, 10 - Laser, 11 - Filtro, 12 - “Chopper”, 13 - Sistema de vácuo, 14 - Sistema de ciclo fechado de hélio, 15 - Lente $f = 4,5$ cm, 16 - Filtro, 17 -Fotodetector, 18 - Amplificador, 19 - “Lock -in”, 20 - Sistema de aquisição de dados, 21 - Micro-computador, 22 - Motor de passo.

Sobre a mesma região da amostra incide o feixe do “laser” (“laser de diodo” - 1 mW e 633nm), que é modulado antes de atingir a amostra, por um “chopper” (modelo SR540 - Stanford), que gira a uma frequência fixa (utilizamos em nossas medidas a frequência de 200 Hz). Filtros de densidade neutra (11) podem ser inseridos no caminho óptico do “laser”, diminuindo sua intensidade da maneira que se desejar. O feixe de luz proveniente do espectrômetro é refletido pela amostra, passa através de uma lente (15), também escolhida de maneira a otimizar a focalização do feixe sobre a área ativa de um

fotodetector de Si; na frente deste fotodetector é usado um filtro óptico RG 715 (Schott), que impede a passagem da luz do “laser” espalhada pela amostra. O fotodetector transforma a intensidade luminosa em um sinal elétrico, que é amplificado pelo pré-amplificador. Este sinal tem uma componente proporcional à refletividade da amostra (R) e outra componente proporcional à variação da refletividade causada pelo laser (ΔR), onde $R \gg \Delta R$.

O sinal amplificado é enviado simultaneamente para uma das entradas do sistema de aquisição de dados e para o “lock-in” (modelo SR510 - Stanford). A frequência de rotação do “chopper” serve como referência para o “lock-in”, que amplificará somente a componente do sinal que estiver nesta frequência (isto é, ΔR), desprezando todas as outras componentes. O sinal de saída do “lock-in” (ΔR) é então enviado para a outra entrada do sistema de aquisição de dados. O sistema faz a leitura dos dois sinais (R e ΔR), armazena as informações, enquanto simultaneamente mostra na tela do microcomputador o gráfico da razão $\Delta R/R$ em função do comprimento de onda, que é o espectro de fotorefletância.

4.4 A TÉCNICA DE ELETRORREFLETÂNCIA SEM CONTATO

4.4.1 Sistema Experimental de Eletrorefletância sem Contato

A descrição do sistema experimental da técnica de eletrorefletância sem contato é igual à do sistema de fotorefletância, diferindo no seguinte aspecto: ao invés de uma “laser” modulado por um “chopper” empregamos como fonte de modulação um campo elétrico de 10kV/cm, fornecido por uma fonte de alta tensão (modelo 677B - Trek), o qual é aplicado através de um capacitor cujos os eletrodos são formados por uma placa de cobre e uma lâmina de FTO. Esse campo é modulado por um gerador de sinais (modelo MFG4202 – Minipa) no modo de onda quadrada a uma frequência fixa de 80 Hz. A frequência da onda quadrada do gerador de sinais servirá como referência para o “lock –in” (modelo SR510 - Stanford). O osciloscópio (modelo 2261 – Y - Tectronic) é usado para medir o sinal de saída da fonte de alta tensão em um escala 50 vezes menor que o valor real, a fim de verificar a adequada aplicação do campo elétrico sobre a amostra. Na Figura 19 está esquematizada a montagem experimental da técnica de eletrorefletância sem contato. No sistema de medidas

de CER houve a necessidade de se fazer uma preparação especial no porta – amostra contido no interior do criostato, com a finalidade de aplicar uma diferença de potencial de 1kV na amostra e, ao mesmo tempo, isolar eletricamente o sensor de temperatura do eletrodo de cobre. A Figura 20 mostra um esquema da célula utilizada para aplicação do campo elétrico sobre a amostra, onde a distância d entre as placas de FTO e de cobre é de aproximadamente 1mm.

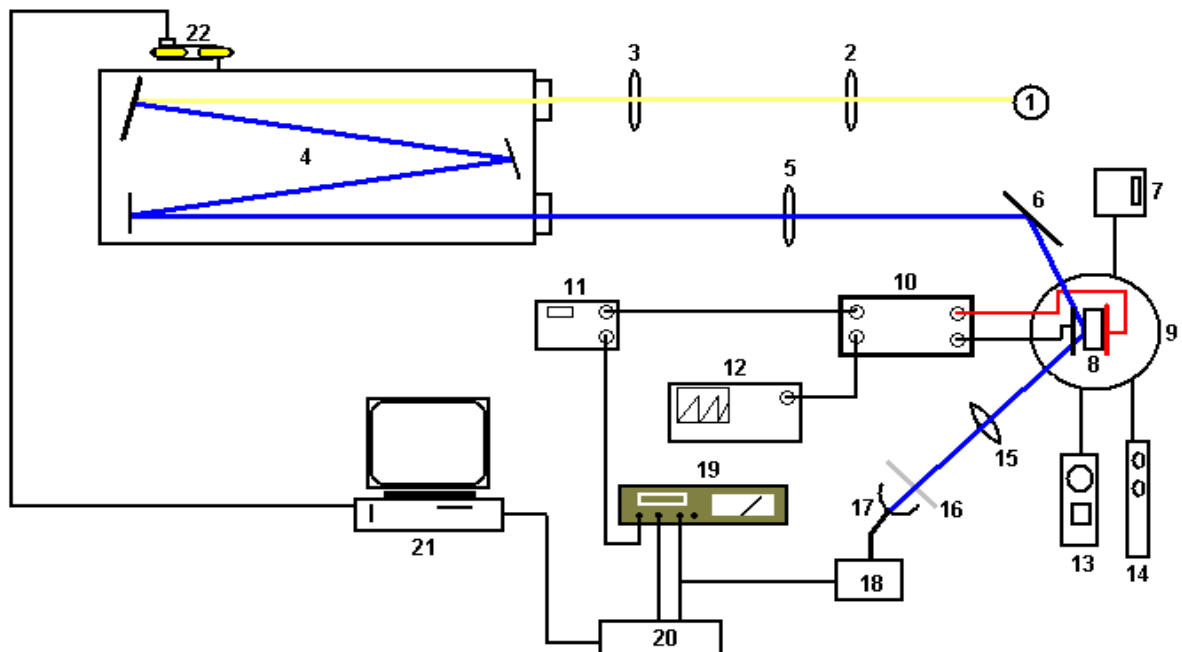


Figura 10 – Esquema da montagem experimental utilizada na obtenção dos espectros de eletrorefletância sem contato: 1 - Lâmpada, 2 - Lente $f=11,5$ cm, 3 - Lente $f=21,0$ cm, 4 - Espectrômetro, 5 - Lente $f=10,5$ cm, 6 - Espelho, 7 - Sistema de controle de temperatura, 8 - Amostra, 9 -Criostato, 10 – Fonte de alta tensão, 11 – Gerador de sinais, 12 - Osciloscópio, 13 - Sistema de vácuo, 14 - Sistema de ciclo fechado de hélio, 15 - Lente $f=4,5$ cm, 16 -Filtro, 17 -Fotodetector, 18 - Amplificador, 19 - “Lock –in”, 20 - Sistema de aquisição de dados, 21 - Micro-computador, 22 - Motor de passo.

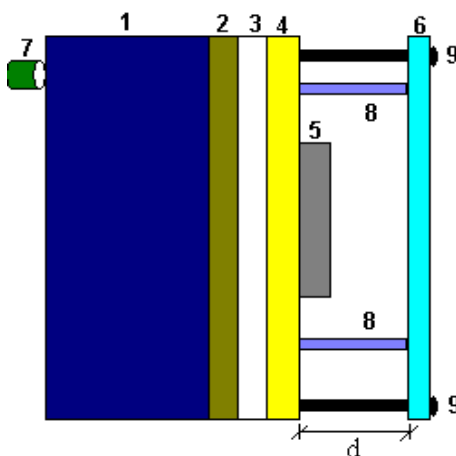


Figura 11 – Esquema da montagem no interior do criostato: 1-Porta amostra, 2 - Mica, 3 - Pasta térmica, 4 - Lâmina de cobre, 5 - Amostra, 6 - Lâmina de FTO, 7 - Sensor de temperatura, 8 – Espaçadores (borrachas), 9 – Fixadores (parafusos).

O objetivo inicial era realizar as medidas de CER da amostra a temperaturas de até 12 K sobre a amostra, o que não foi possível devido ao fato de termos que isolar eletricamente o sensor de temperatura. Para realizar esse isolamento utilizamos a mica e a pasta térmica, as quais serviram como isolantes elétricos e condutores térmicos entre a lâmina de cobre e o porta amostra, não permitindo a passagem de corrente elétrica até o sensor e resfriando a amostra, porém a condução térmica não ocorreu da forma desejada, sendo que a menor temperatura registrada sobre a amostra foi de 66 K.

Dessa forma surgiu a necessidade de corrigir as medidas da temperatura. A seguir descrevemos como isso foi feito. O controlador de temperatura possui dois sensores, o sensor A que sempre fica conectado ao dedo frio do criostato, próximo a resistência de aquecimento e o sensor B que pode ser conectado em qualquer ponto escolhido da célula. Primeiramente realizamos as medidas conectando o sensor B no porta – amostras e com a fonte de alta tensão ligada, conforme representado na Figura 20, registramos os valores nos sensor A e B (caso I), em seguida repetimos o mesmo procedimento mas agora com o sensor B conectado a placa de cobre e com a fonte de alta tensão desligada (caso II), tomando como referência o valor da temperatura no sensor A no caso I. Assim estimamos o valor da temperatura sobre amostra nas medidas de eletrorefletância sem contato de forma segura. Os valores para a correção das medidas de temperatura sobre a amostra são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 – Correções dos valores de T para eletrorefletância sem contato.

<i>T (K) – Sensor A</i>	<i>T (K) – Sensor B</i>	<i>T (K) – Sensor B</i>
	<i>Caso I</i>	<i>II</i>
12	20	66
26	29	70
36	39	75
47	50	82
58	60	90
68	70	97
78	80	103
89	91	112
99	101	120
119	121	134
139	140	152
159	161	168

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados teóricos e experimentais obtidos para todas as heteroestruturas descritas no Capítulo 4, bem como a análise dos mesmos. Inicialmente, no item 5.2 serão apresentados os resultados teóricos obtidos para os níveis de energia dos portadores de carga e para a energia de ligação excitônica nos diferentes PQS e PQDAs. No item 5.3 serão mostrados os resultados das medidas de PR realizadas à baixas temperaturas, para todas as amostras. Será realizada a comparação entre os resultados teóricos e os resultados experimentais, obtidos através de PL^[81] e através de PR, das energias de transição excitônica em todas as estruturas. Na seqüência, no item 5.4, serão apresentados os resultados das medidas de CER realizadas entre 60 e 170 K para a amostra #8 e entre 60 e 140 K para a amostra #9, onde será feita uma comparação com as medidas de PR. No item 5.5 serão mostrados os gráficos da energia da transição excitônica em função da temperatura, para as transições e_1-hh_1 , e_1-lh_1 do PQS e $e_{1S}-hh_{1S}$, $e_{1S}-lh_{1S}$, $e_{1A}-hh_{1A}$ e $e_{1A}-lh_{1A}$ dos PQDAs. Finalmente, no item 5.6 serão mostrados os ajustes das curvas da dependência da energia da transição excitônica com a temperatura ($E_g(T)$), utilizando os modelos de Viña e de Passler par as transições citadas.

5.2 ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA E ENERGIA DE TRANSIÇÃO EXCITÔNICA DO PQS E DOS PQDAs.

5.2.1 Níveis de Energia do PQS

De acordo com a metodologia apresentada no item 2.3.1, os níveis de energia dos portadores de carga em um PQS foram obtidos através das seguintes expressões^[39]:

$$k_w L_w = p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{k_w / m_w^*}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \quad (16)$$

onde L_w é a largura do poço, $p = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal e indexa os níveis de energia, k_w e κ_b representam, respectivamente, os vetores de onda no interior do poço e na região das barreiras, e são definidos como:

$$k_{we(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(h)}^* E_p} \quad (14)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (15)$$

onde m_w^* e m_b^* são, respectivamente, as massas efetivas dos portadores nas regiões do poço e das barreiras de potencial, $\Delta E_{c(v)}$ é o potencial do poço (o índice c representa o potencial do poço para elétrons (e), na banda de condução, e o índice v representa o potencial do poço para buracos (h), na banda de valência), E_p é a energia do p -ésimo estado ocupado pelo portador no poço quântico. Os parâmetros utilizados nos cálculos foram apresentados no item 4.2.1.

Na Tabela 3 são resumidos os resultados obtidos para o PQS com concentração de alumínio de $x = 0,15$. São mostrados os valores para o primeiro e segundo níveis de elétrons (e_1) e (e_2), para o primeiro e segundo níveis de buracos pesados (hh_1) e (hh_2) e para o primeiro e segundo níveis de buracos leves (lh_1) e (lh_2).

Tabela 3 – Níveis de energia calculados para o PQS com $x = 0,15$.

<i>Nível</i>	<i>Valor (meV)</i>
e_1	36,0
e_2	126,3
hh_1	9,7
hh_2	37,7
lh_1	23,6
lh_2	74,6

5.2.2 Níveis de Energia dos PQDAs

De acordo com a metodologia apresentada no item 2.4.1, os níveis de energia dos portadores de carga em um PQDA foram obtidos através da seguinte expressão^[42]:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \pm \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) \quad (31)$$

onde:

$$\zeta = \frac{\kappa_b m_w^*}{k_w m_b^*}, \quad (32)$$

L_w é a largura do poço, L_b é a espessura do “spike”, k_w e κ_b representam, respectivamente, os vetores de onda no interior do poço e na região das barreiras (os mesmos dados pelas Equações (14) e (15)), m_w^* e m_b^* são, respectivamente, as massas efetivas dos portadores nas regiões do poço e das barreiras de potencial. Os parâmetros utilizados nos cálculos foram apresentados no item 4.2.1.

Na Tabela 4 são resumidos os resultados obtidos para todas as estruturas de PQDAs, com concentração de alumínio de $x = 0,15$. São mostrados os valores para o primeiro nível simétrico e anti - simétrico de elétrons (e_{1S}) e (e_{1A}), e para o primeiro nível simétrico e

anti-simétrico de buracos pesados (hh_{1S}) e (hh_{1A}) e para o primeiro nível simétrico e anti-simétrico de buracos leves (lh_{1S}) e (lh_{1A})

Tabela 4 – Níveis de energia calculados para os PQDAs com $x=0,15$.

<i>Estrutura</i>	e_{1S} (meV)	e_{1A} (meV)	hh_{1S} (meV)	hh_{1A} (meV)	lh_{1S} (meV)	lh_{1A} (meV)
PQDA5 ($L_b = 5 \text{ \AA}$)	43,3	118,3	14,6	34,1	27,1	70,9
PQDA15 ($L_b = 15 \text{ \AA}$)	53,1	104,1	19,8	29,1	32,2	66,3
PQDA30 ($L_b = 30 \text{ \AA}$)	62,2	90,6	22,8	25,9	36,9	58,8

5.2.3 Cálculo da Energia de Ligação Excitônica no PQS

Seguindo a metodologia descrita no item 2.5.6, a energia de ligação excitônica no PQS foi determinada utilizando a expressão^[45]:

$$E_b = \frac{4E_0}{[2n + \alpha - 3]^2} \quad (60)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal (para os nossos cálculos, $n = 1$), α é a dimensionalidade do sistema e E_0 é a energia de ligação do éxciton no material “bulk”. E_0 e α devem ser considerados levando em conta todas as correções para os parâmetros dos quais eles dependem: ε^* (constante dielétrica efetiva do meio) e a_0^* (raio de Bohr efetivo). Considerando o modelo MLC, α e E_0 são dados, respectivamente, por:

$$\alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_w^*}{2a_0^*}\right) \quad (48)$$

$$E_0 = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon^*}\right)^2 \frac{\mu^*}{m_0} \times R_y \quad (40)$$

onde L_w^* é a largura efetiva do poço dada por:

$$L_w^* = \frac{1}{K_b} + L_w + \frac{1}{K_b} \quad (49)$$

onde $K_b = 1/k_{be} + 1/k_{bh}$, sendo k_{be} e k_{bh} os vetores de onda dos portadores na região das barreiras.

E a_0^* é o raio de Bohr do éxciton em um material “bulk” que, com as correções propostas pelo modelo MLC, é dado por:

$$a_0^* = \left(\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon_0} \right) \frac{m_0}{\mu^*} \times a_B \quad (41)$$

em que ε_0 é a constante dielétrica do vácuo, ε^* é a constante dielétrica efetiva do meio, μ^* é a massa reduzida efetiva do éxciton, m_0 é a massa do elétron livre, R_y é a constante de Rydberg e a_B é o raio de Bohr. As correções propostas pelo modelo MLC estão embutidas nos parâmetros ε^* e μ^* . As energias de ligação excitônica e as dimensionalidades foram calculadas para as transições excitônicas e_1-hh_1 , e_1-lh_1 , e_2-hh_2 e e_2-lh_2 do PQS, para a concentração de alumínio de 15% ($x = 0,15$).

Tabela 5 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para o PQS com $x = 0,15$.

<i>Transição</i>	<i>E_b (meV)</i>	<i>α</i>
e_1-hh_1	8,8	2,44
e_1-lh_1	8,4	2,45
e_2-hh_2	7,2	2,60
e_2-lh_2	6,2	2,75

5.2.4 Cálculo da Energia de Ligação Excitônica nos PQDAs

Para o cálculo da energia de ligação excitônica no PQDA, usamos as mesmas expressões utilizadas em sistemas de PQS, porém o PQDA é substituído por um poço simples cuja largura L_w é substituída por uma largura L_{wef} que é dada por:

$$L_w = L_{wef} = L_{w1} + L_{w2} \exp(-L_b K_s) \quad (62)$$

onde L_b é a espessura do “spike”, e o parâmetro K_s representa o vetor característico da penetração do éxciton no “spike”, e é responsável por caracterizar a interação entre os dois poços, sendo dado por^[33]:

$$\frac{1}{K_s} = \frac{1}{\kappa_{se}} + \frac{1}{\kappa_{sh}} \quad (63)$$

onde os parâmetros κ_{se} e κ_{sh} são os vetores de onda do elétron e do buraco na região do “spike”, respectivamente, e são obtidos a partir da Equação (63). Os demais parâmetros são os mesmos utilizados para o cálculo da energia de ligação excitônica nos PQS. As correções propostas pelo modelo MLC estão embutidas nos parâmetros ε^* e μ^* . As energias de ligação excitônica e as dimensionalidades calculadas para os estados $e_{1S}-hh_{1S}$, $e_{1S}-lh_{1S}$, $e_{1A}-hh_{1A}$ e $e_{1A}-lh_{1A}$ dos PQDAs, para as concentrações de alumínio de $x = 0,15$ e “spike” 5 Å são mostradas na Tabela 6 e para os “spikes” 15 Å e 30 Å são mostradas na Tabela 7.

Tabela 6 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para o PQDA com $x = 0,15$ de alumínio e “spike” 5 Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>E_b (meV)</i>	<i>α</i>
PQDA5	$e_{1S}-hh_{1S}$	8,9	2,45
($L_b = 5$)	$e_{1S}-lh_{1S}$	8,7	2,46
	$e_{1A}-hh_{1A}$	7,6	2,56
	$e_{1A}-lh_{1A}$	7,0	2,65

Tabela 7 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para os PQDAs com $x = 0,15$ de alumínio e “spikes” 15Å e 30Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>E_b (meV)</i>	<i>α</i>
PQDA15 ($L_b = 15 \text{ \AA}$)	$e_{1S}-hh_{1S}$	9,2	2,43
	$e_{1S}-lh_{1S}$	8,3	2,44
	$e_{1A}-hh_{1A}$	8,2	2,50
	$e_{1A}-lh_{1A}$	7,6	2,58
PQDA30 ($L_b = 30 \text{ \AA}$)	$e_{1S}-hh_{1S}$	9,3	2,42
	$e_{1S}-lh_{1S}$	8,9	2,44
	$e_{1A}-hh_{1A}$	8,7	2,46
	$e_{1A}-lh_{1A}$	8,2	2,51

5.2.5 Cálculo da Energia de Transição Óptica no PQS e nos PQDAs

Com os resultados obtidos até este ponto, é possível fazer o cálculo teórico da energia de transição óptica nas estruturas de PQS e PQDA. As energias de transição excitônica, E_t , entre o primeiro nível de elétrons e o primeiro nível de buracos pesados e leves, entre o segundo nível de elétrons e o segundo nível de buracos pesados e leves para os PQS, entre o primeiro nível simétrico de elétrons e o primeiro nível simétrico de buracos pesados e leves e entre o primeiro nível anti-simétrico de elétrons e o primeiro nível anti-simétrico de buracos pesados e leves para os PQDAs, são dadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$E_t = E_g + e_1 + hh_1 - E_b$$

$$E_t = E_g + e_1 + lh_1 - E_b$$

$$E_t = E_g + e_2 + hh_2 - E_b$$

$$E_t = E_g + e_2 + lh_2 - E_b$$

$$E_t = E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$$

$$E_t = E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$$

$$E_t = E_g + e_{2S} + hh_{2S} - E_b$$

$$E_t = E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$$

onde a energia de “gap”, E_g , do material constituinte dos poços, GaAs, é dada por^[34]:

$$E_g = 1519,4 \text{ meV} \quad (90)$$

Para os PQS, as Tabelas 3 e 5 fornecem os valores dos níveis de energia e_1 , e_2 , hh_1 , hh_2 , lh_1 , lh_2 e da energia de ligação excitônica E_b , respectivamente. Para os PQDAs, as Tabelas 4 e 6 fornecem os valores dos níveis de energia e_{1S} , e_{1A} , hh_{1S} , lh_{1S} , hh_{1A} , lh_{1A} e da energia de ligação excitônica E_b , respectivamente. Na Tabela 8 são mostrados os resultados teóricos obtidos para a energia de transição excitônica para o PQS e PQDA com “spike” 15 Å e na Tabela 9 para os PQDA com “spikes” 5 Å e 30 Å.

Tabela 8 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$) calculadas para o PQS e PQDA com “spike” 5 Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Valor (eV)</i>
PQS	$E_g + e_1 + hh_1 - E_b$	1,556
	$E_g + e_1 + lh_1 - E_b$	1,571
	$E_g + e_2 + hh_2 - E_b$	1,676
	$E_g + e_2 + lh_2 - E_b$	1,714
PQDA15 ($L_b = 15 \text{ \AA}$)	$E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$	1,583
	$E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$	1,596
	$E_g + e_{1A} + hh_{1A} - E_b$	1,645

Tabela 9 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{t(teo)}$) calculadas para os PQDAs com “spikes” 15 Å e 30 Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Valor (eV)</i>
PQDA5 ($L_b = 5 \text{ \AA}$)	$E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$	1,568
	$E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$	1,581
	$E_g + e_{1A} + hh_{1A} - E_b$	1,664
	$E_g + e_{1A} + lh_{1A} - E_b$	1,702
PQDA30 ($L_b = 30 \text{ \AA}$)	$E_g + e_{1A} + lh_{1A} - E_b$	1,682
	$E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$	1,595
	$E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$	1,610
	$E_g + e_{1A} + hh_{1A} - E_b$	1,627
	$E_g + e_{1A} + lh_{1A} - E_b$	1,661

5.3 RESULTADOS EXPERIMENTAIS: FOTOREFLETÂNCIA À BAIXA TEMPERATURA

As Figuras 21 e 22 mostram os espectros de fotorefletância, com seus ajustes a baixa temperatura, das amostras #8 e #9, respectivamente. Os ajustes foram obtidos utilizando a expressão:

$$\frac{\Delta R}{R} = C e^{i\phi} (E - E_g + i\Gamma)^{-m} \quad (91)$$

onde C é a amplitude, ϕ é a fase, E_g é a energia de transição, Γ é a largura de linha e m é a dimensionalidade. Os valores encontrados para as transições excitônicas, através dos ajustes, são mostrados nas figuras.

Com os espectros dessas amostras (Figs.21 e 22) e com os cálculos teóricos apresentados nas Tabelas 8 e 9 é possível identificar as origens das transições excitônicas apresentadas pelas duas amostras. Na Figura 21 os pontos 1,559 eV e 1,573 eV são identificados como a energias de transição excitônica entre os níveis e_1-hh_1 e e_1-lh_1 do poço quântico simples de largura 80 Å. Os pontos 1,587 eV e 1,598 eV são identificados como sendo a energia de transição excitônica entre os níveis $e_{1S}-hh_{1S}$ e $e_{1S}-lh_{1S}$ do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 15 Å e os pontos 1,647 eV e 1,683 eV como sendo a energia de transição excitônica entre os níveis $e_{1A}-hh_{1A}$ e $e_{1A}-lh_{1A}$ do poço quântico duplo anti-simétrico com barreira central de 15 Å. Na Figura 22 os pontos 1,572 eV e 1,583 eV são identificados como sendo as energias de transição excitônica entre os níveis $e_{1S}-hh_{1S}$ e $e_{1S}-lh_{1S}$ do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 5 Å, e o ponto 1,664 eV é identificado como sendo a energia de transição excitônica entre o nível $e_{1A}-hh_{1A}$ do poço quântico duplo anti-simétrico com barreira central de 5 Å. Os pontos 1,600 eV e 1,613 eV são identificados como sendo a energia de transição excitônica entre os níveis $e_{1S}-hh_{1S}$ e $e_{1S}-lh_{1S}$ do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 30 Å, e o ponto 1,633 eV é identificado como sendo a energia de transição excitônica entre o nível $e_{1A}-hh_{1A}$ do poço quântico duplo anti-simétrico com barreira central de 30 Å.

Na Tabela 10 são apresentados os valores teóricos (Tabelas 8 e 9); os resultados experimentais de PR a 12 K para as energias de transição excitônica para o PQS entre os níveis e_1-hh_1 , e_1-lh_1 ; PQDA com “spike” 15 Å entre os níveis $e_{1S}-hh_{1S}$, $e_{1S}-lh_{1S}$, $e_{1A}-$

hh_{1A} e $e_{1A}-lh_{1A}$; PQS entre os níveis e_1-lh_{1B} ¹ e os valores experimentais de PL a 10 K^[81] para as energias de transição excitônica para o PQS entre os níveis e_1-hh_1 e PQDA com “spike” 15 Å entre os níveis $e_{1S}-hh_{1S}$ referentes à amostra #8.

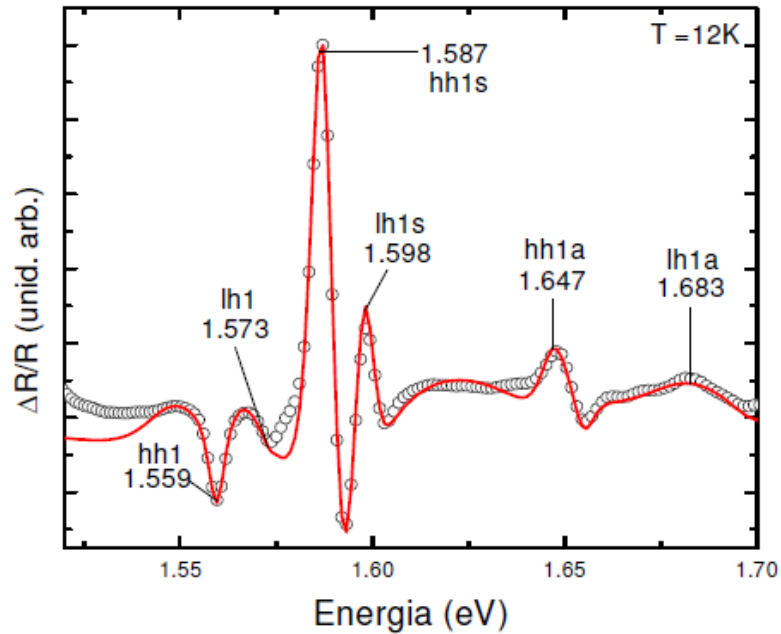


Figura 12 – Espectro de PR da amostra #8 obtido a 12 K.

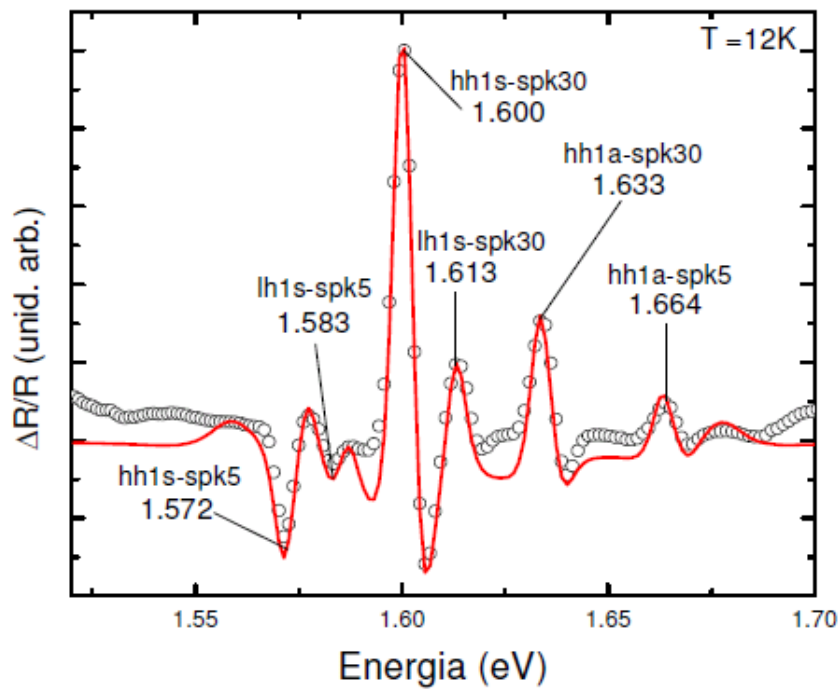


Figura 13 – Espectro de PR da amostra #9 obtido a 12 K.

¹ Transição banda – banda que surgiu no espectro de PR somente a partir de 25 K.

Tabela 10 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{i(teo)}$); de PR a 12 K e de PL a 10 K, para o PQS e para o PQDA com “spike” 15 Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Valor Teórico</i> (eV)	<i>Valor de PR</i> (eV)	<i>Valor de PL</i> (eV)
PQS	$E_g + e_l + hh_l - E_b$	1,556	1,559	1,557
	$E_g + e_l + lh_{lB}$	1,579	1,580	X
	$E_g + e_l + lh_l - E_b$	1,571	1,573	X
PQDA15 (L _b = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	1,583	1,587	1,584
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	1,596	1,598	X
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	1,645	1,647	X
	$E_g + e_{lA} + lh_{lA} - E_b$	1,682	1,683	X

Na Tabela 11 são apresentados: os valores teóricos (Tabela 8 e 9); os valores experimentais de PR a 12 K para as energias de transição excitônica para o PQDA com “spike” 5 Å entre os níveis $e_{lS}-hh_{lS}$, $e_{lS}-lh_{lS}$ e $e_{lA}-hh_{lA}$; PQDA com “spike” 30 Å entre os níveis $e_{lS}-hh_{lS}$, $e_{lS}-lh_{lS}$, $e_{lA}-hh_{lA}$ e os valores experimentais de PL a 10 K^[81] para as energias de transição excitônica para o PQDA com “spike” 5 Å entre os níveis $e_{lS}-hh_{lS}$ e para o PQDA com “spike” 30 Å entre os níveis $e_{lS}-hh_{lS}$ referentes à amostra #9.

Tabela 11 – Energias de transição excitônica teóricas ($E_{i(teo)}$); de PR a 12 K e de PL a 10 K para os PQDAs com “spikes” 5 Å e 30 Å.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Valor Teórico</i> (eV)	<i>Valor de PR</i> (eV)	<i>Valor de PL</i> (eV)
PQDA5 (L _b = 5 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	1,568	1,572	1,570
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	1,581	1,583	X
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	1,664	1,664	X
PQDA30 (L _b = 30 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	1,595	1,600	1,597
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	1,610	1,613	X
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	1,627	1,633	X

Observamos que os valores obtidos por PL são de 2 a 3 meV menores do que os obtidos por PR. Essa diferença pode ser explicada pelas características de cada técnica: enquanto os resultados de PR estão associados diretamente com a absorção, na PL, após a

absorção da radiação pelos portadores, os mesmos relaxam não radiotivamente, através de emissão de fônons, para os estados de menor energia, de onde recombina emitindo a radiação detectada. No caso de haver flutuações de potencial (devido às flutuações nas larguras dos poços ou na concentração da liga), essas flutuações geram uma distribuição de estados de energia logo abaixo da energia de “gap”, no caso da recombinação banda –banda, ou da energia de transição excitônica, no caso da recombinação excitônica; dessa maneira na PL os portadores relaxam para esses estados, antes de recombinar, e assim acabam emitindo radiação de energia inferior à da radiação absorvida.

Na Figura 23 são apresentados os espectros de PR, com os respectivos ajustes, obtidos para a amostra #8 de 12 a 260 K. Na Figura 24 são apresentados os espectros da amostra #9 de 12 a 260 K. Através desses espectros serão obtidos os valores experimentais para a energia de transição excitônica de todas as heteroestruturas nessa faixa de temperatura.

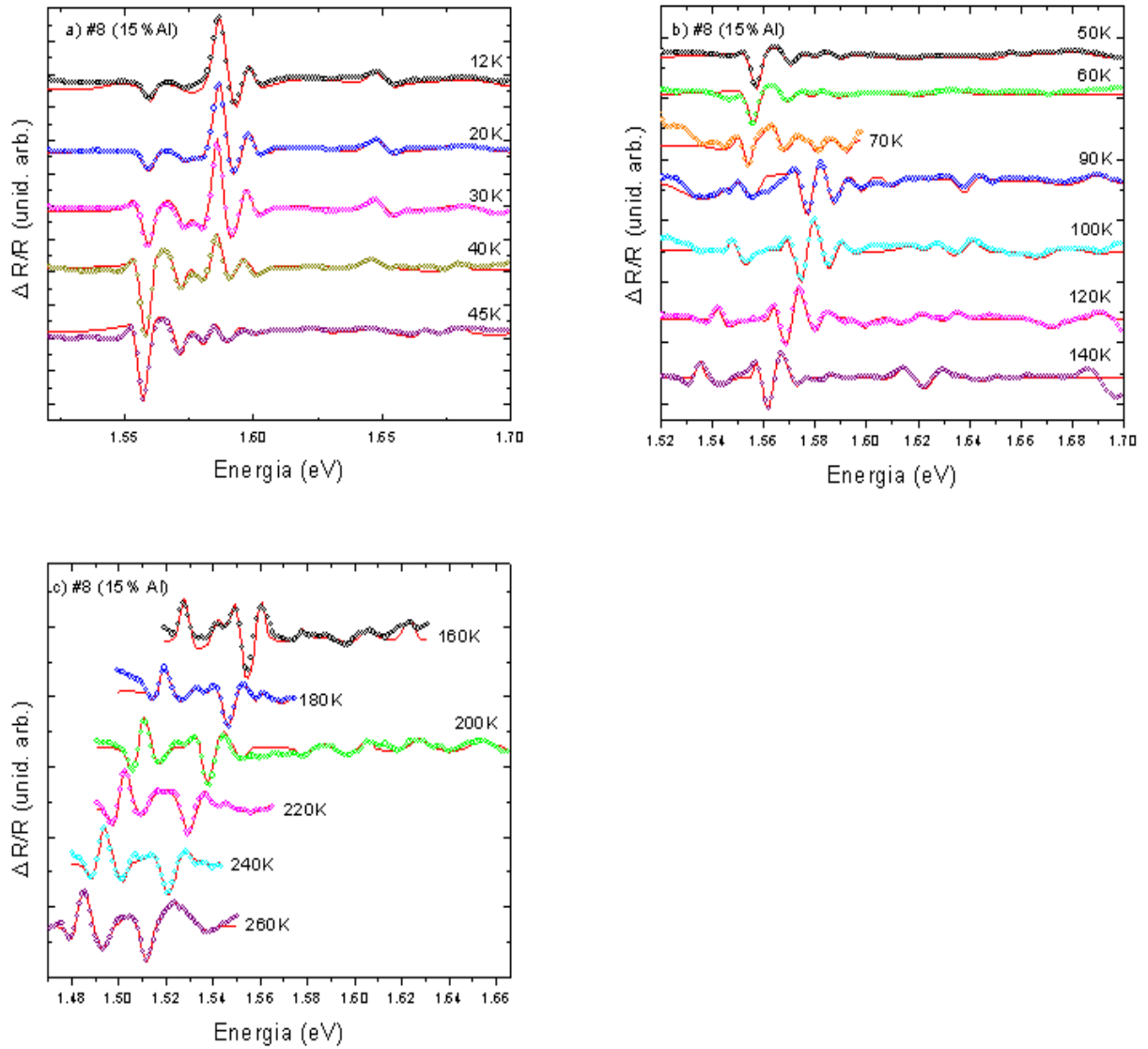


Figura 14 – Espectros de PR para a amostra #8: (a) de 12 K a 45 K; (b) de 50 K a 140 K; (c) de 160 K a 260 K. Os círculos vazios representam os resultados experimentais e a linha contínua em todos os espectros representa o ajuste.

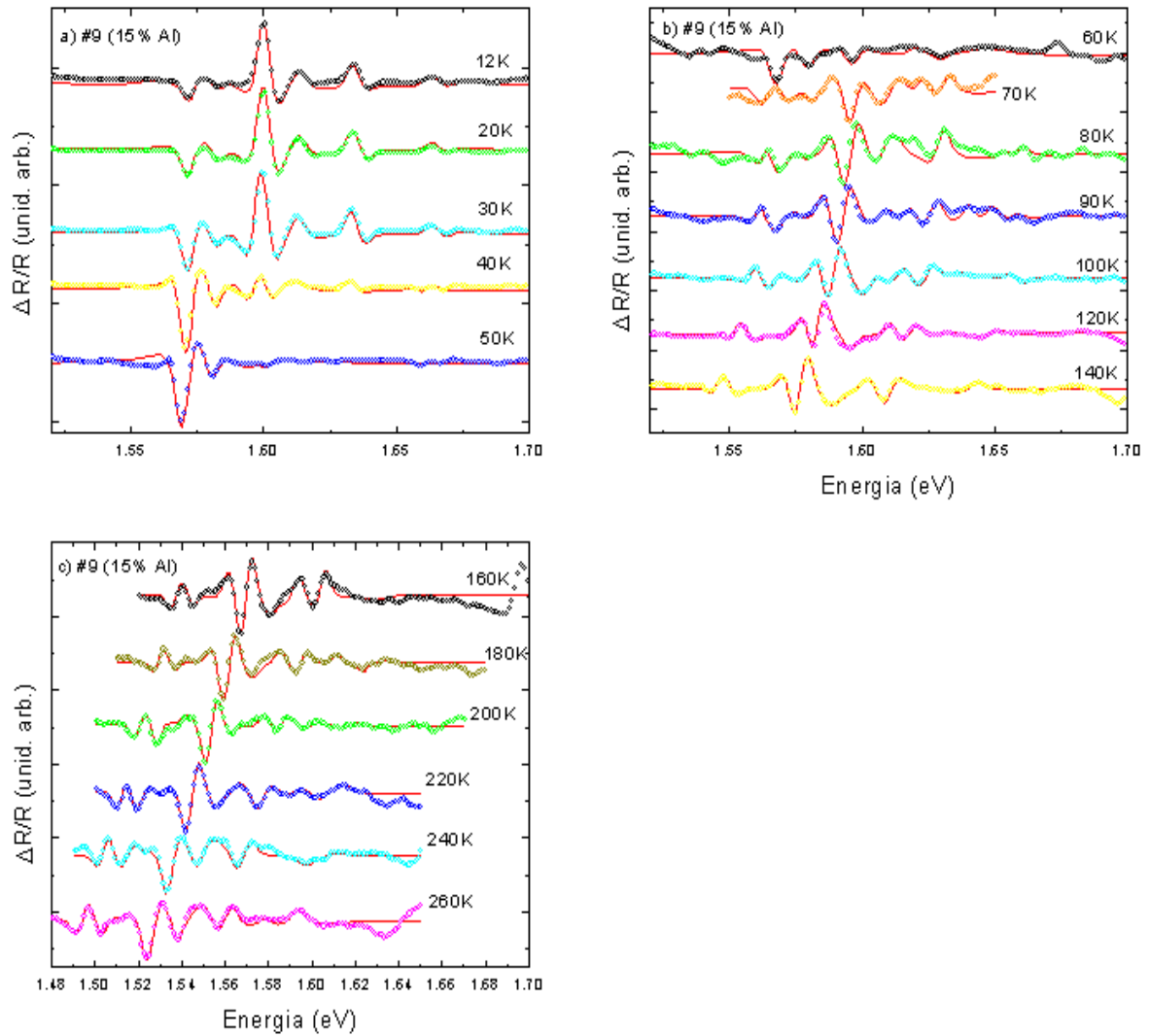


Figura 15 – Espectros de PR para a amostra #9: (a) de 12 K a 45 K; (b) de 50 K a 140 K; (c) de 160 K a 260 K. A linha contínua em todos os espectros representa o ajuste.

É possível observar que para ambas as amostras os espectros de PR entre 50 K e 80 K se tornam menos intensos, porém o motivo do porque isso ocorre ainda é desconhecido.

5.4 RESULTADOS EXPERIMENTAIS: ELETRORREFLETÂNCIA SEM CONTATO À BAIXA TEMPERATURA

A fim de aplicar uma diferença de potencial de 1kV na amostra e, ao mesmo tempo assegurar a integridade funcional de equipamentos como o controlador de temperatura e o sistema de ciclo fechado de hélio, isolamos eletricamente o sensor de temperatura da placa de cobre, usando mica e pasta térmica. Dessa forma, alteramos as condições de montagem no porta – amostras contido no interior do criostato em relação a montagem de PR. Como consequência dessa alteração a faixa de temperatura das medidas de CER ficou entre 66 K e 168 K. Estas condições de montagem estão devidamente explicadas no item IV.D.1.

Na Figura 25 são apresentados os espectros de CER, com os respectivos ajustes, obtidos para a amostra #8 de 66 K a 168 K. Na Figura 26 são apresentados os espectros da amostra #9 de 66 K a 134 K . Através desses espectros foram obtidos os resultados experimentais para a energia de transição excitônica de todas as heteroestruturas, nessas faixas de temperatura.

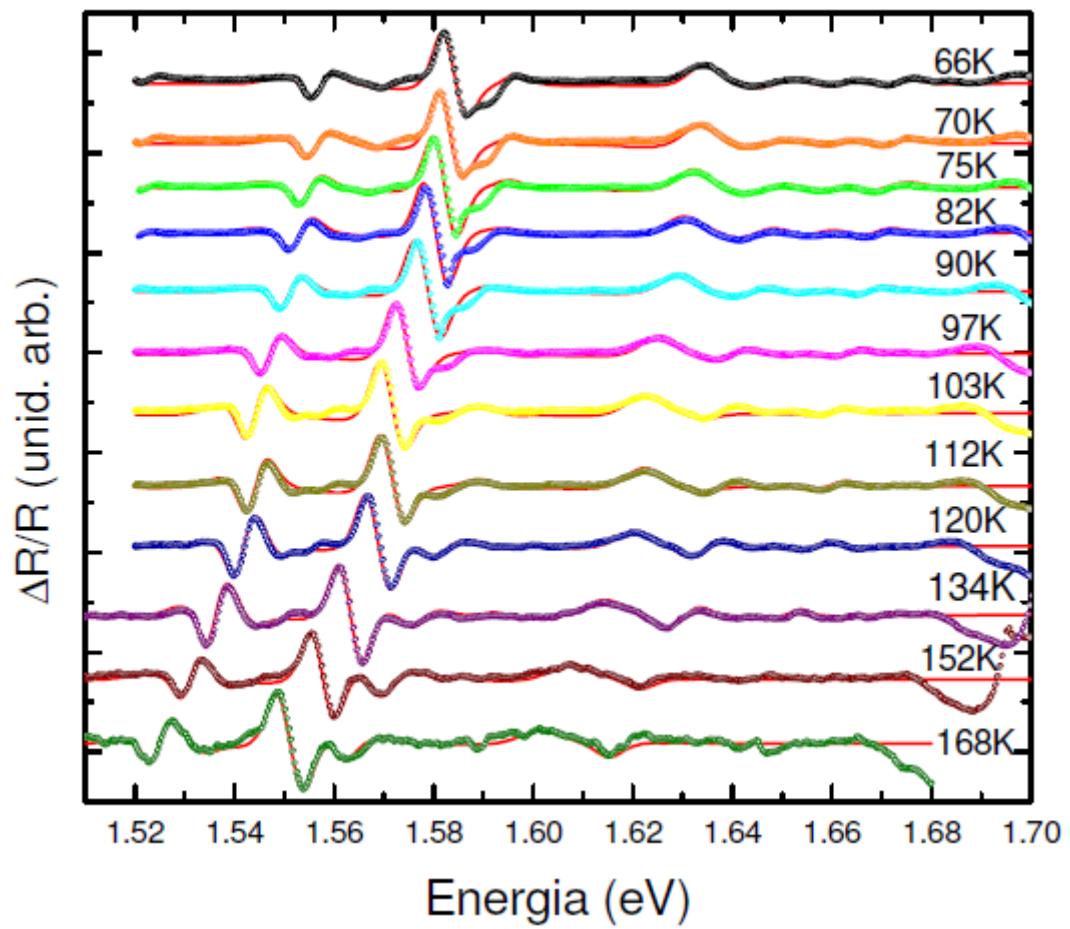


Figura 16 – Espectros de CER para a amostra #8, de 66 K a 168 K. A linha contínua em todos os espectros representa os ajustes.

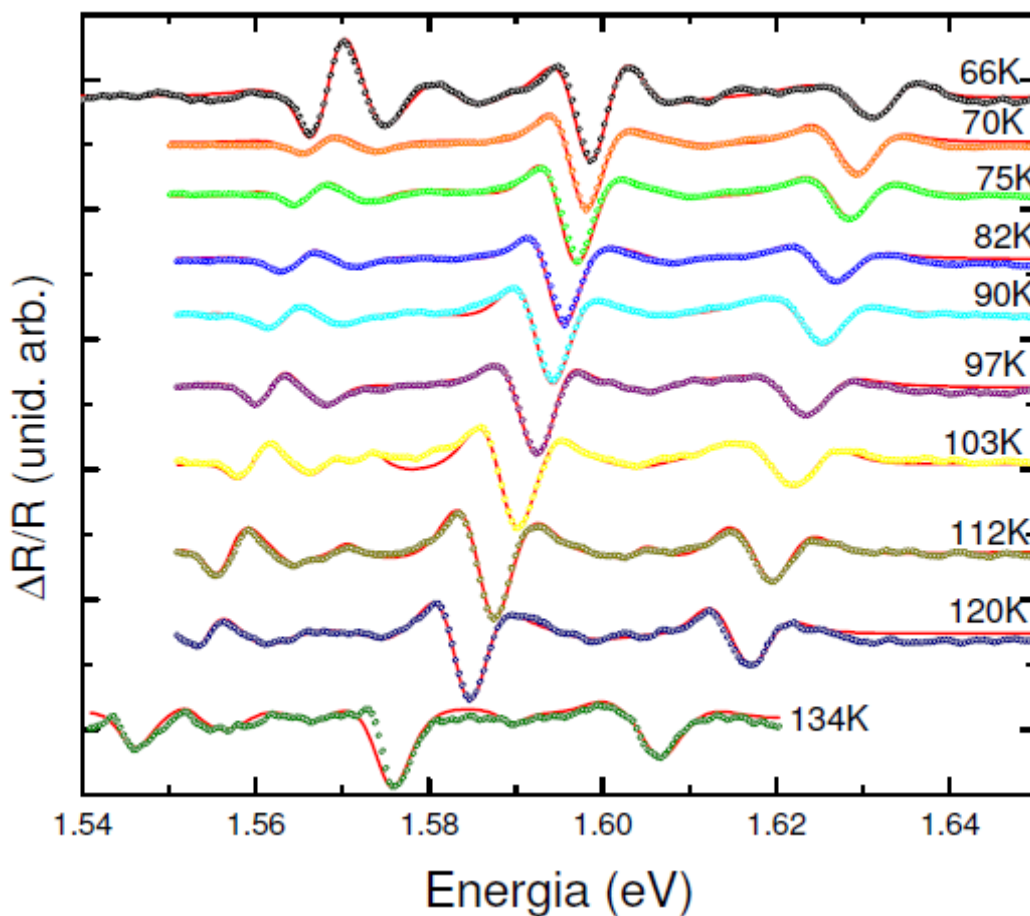


Figura 17 – Espectros de CER para a amostra #9 de 66 K a 134 K. A linha contínua em todos os espectros representa os ajustes.

Observa – se que o mais alto valor de temperatura em que o espectro de CER é observado é de 168 K para a amostra #8 e de 134 K para a amostra #9. Acredita – que isso ocorra devido a características intrínsecas das amostras e também devido aos parâmetros físicos que se alteram, com a elevação da temperatura, no interior do criostato.

Analisando as Figuras 23, 24, 25 e 26 podemos afirmar que para a faixa de temperatura entre 50 K e 80 K a técnica de CER apresenta melhores espectros que a técnica de PR, porém para altas temperaturas a técnica de PR mostra – se mais adequada pois não foi possível obter espectros de CER acima de 168 K.

5.4.1 Comparação entre Espectros de CER e de PR

Na Figura 27 são apresentados os espectros ajustados de CER e de PR a 70 K e na Fig. 28 o de CER e de PR a 90 K, obtidos para a amostra 8. Na Figura 29 são apresentados os espectros ajustados de CER e de PR a 70 K e na Fig. 30 o de CER e o de PR a 90 K, obtidos para a amostra #9 . Foram escolhidos esses valores de temperatura para fazer a comparação, por serem eles os valores mais baixos em que temos os espectros de PR e de CER exatamente na mesma temperatura.

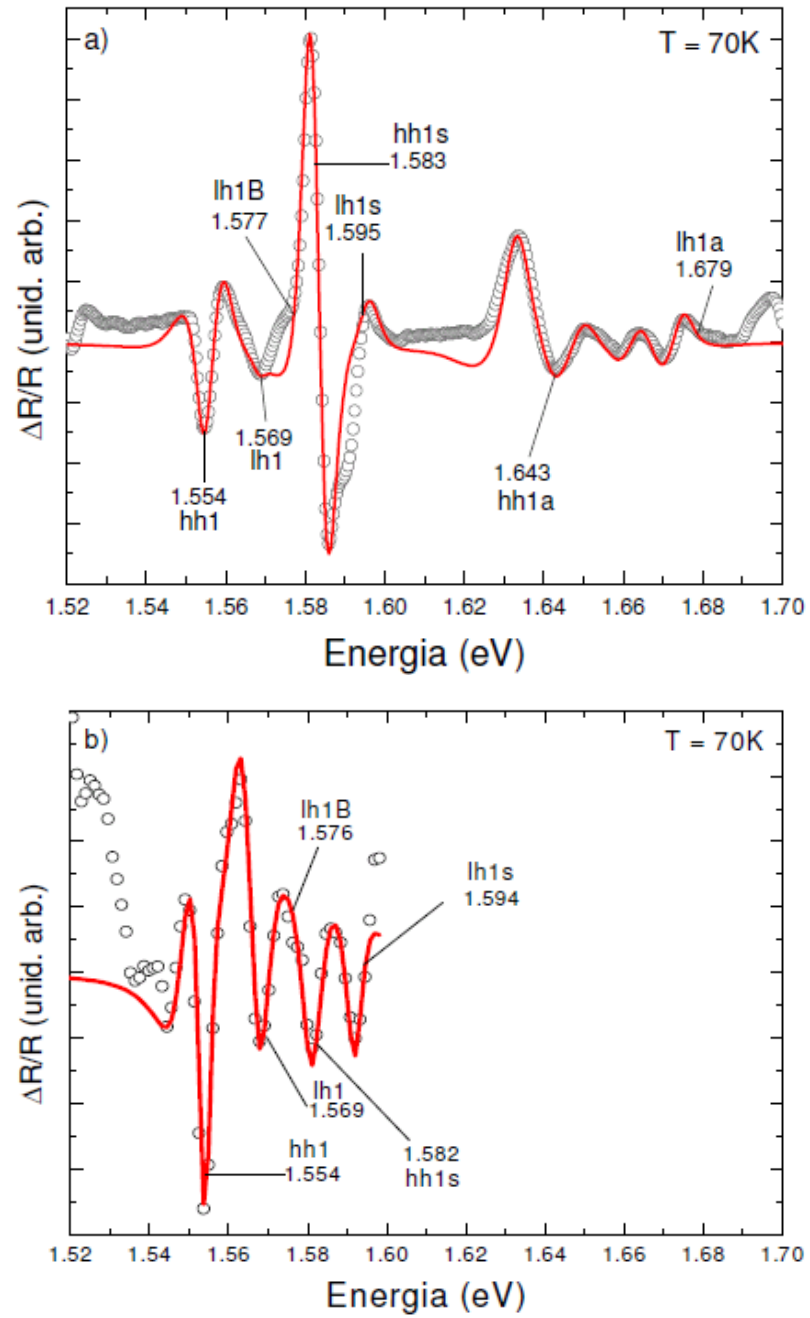


Figura 18 – Espectros de: a) CER a 70 K; b) PR a 70 K, para a amostra #8.

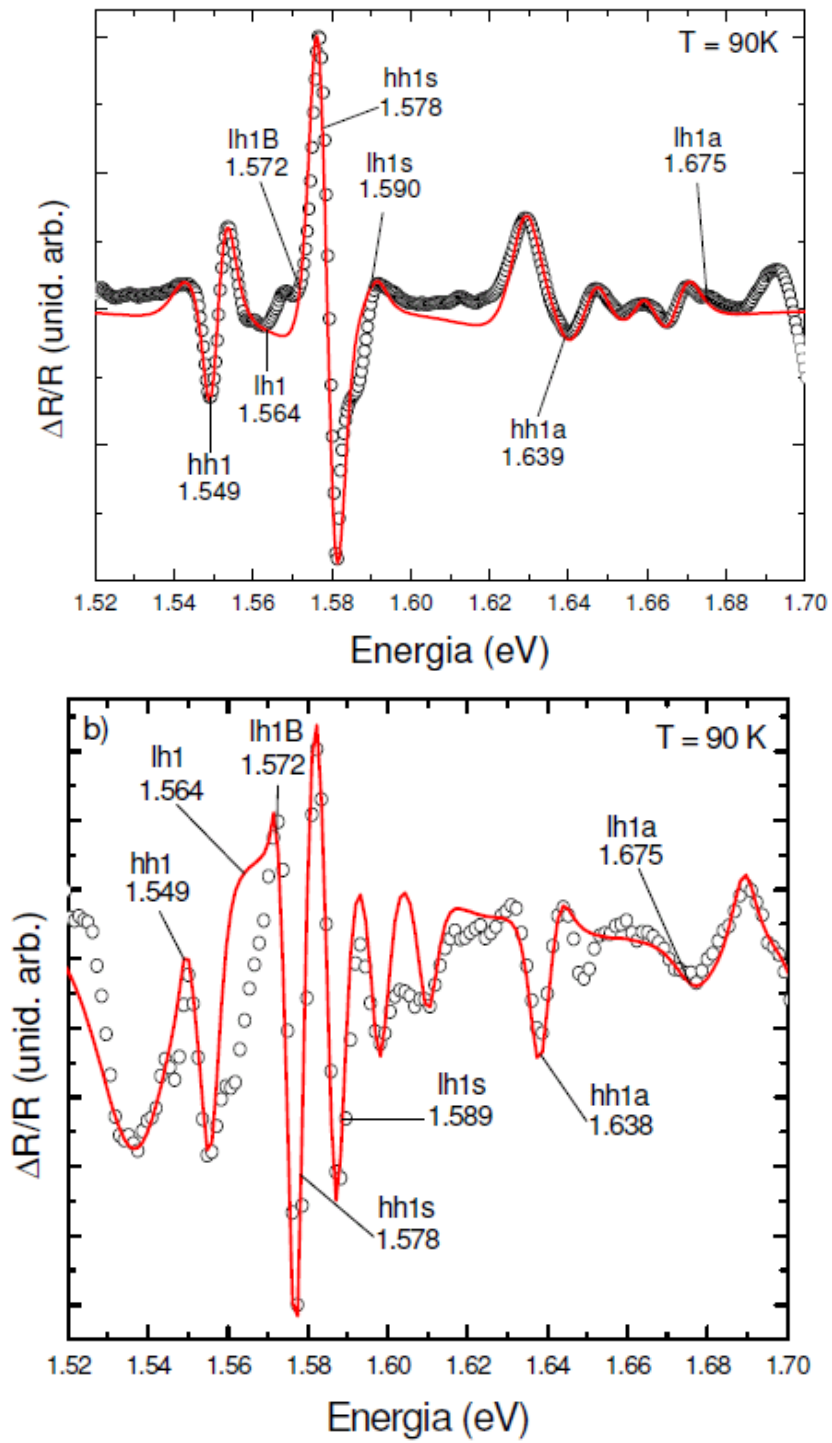


Figura 19 – Espectros de: a) CER a 90 K; b) PR a 90 K, para a amostra #8.

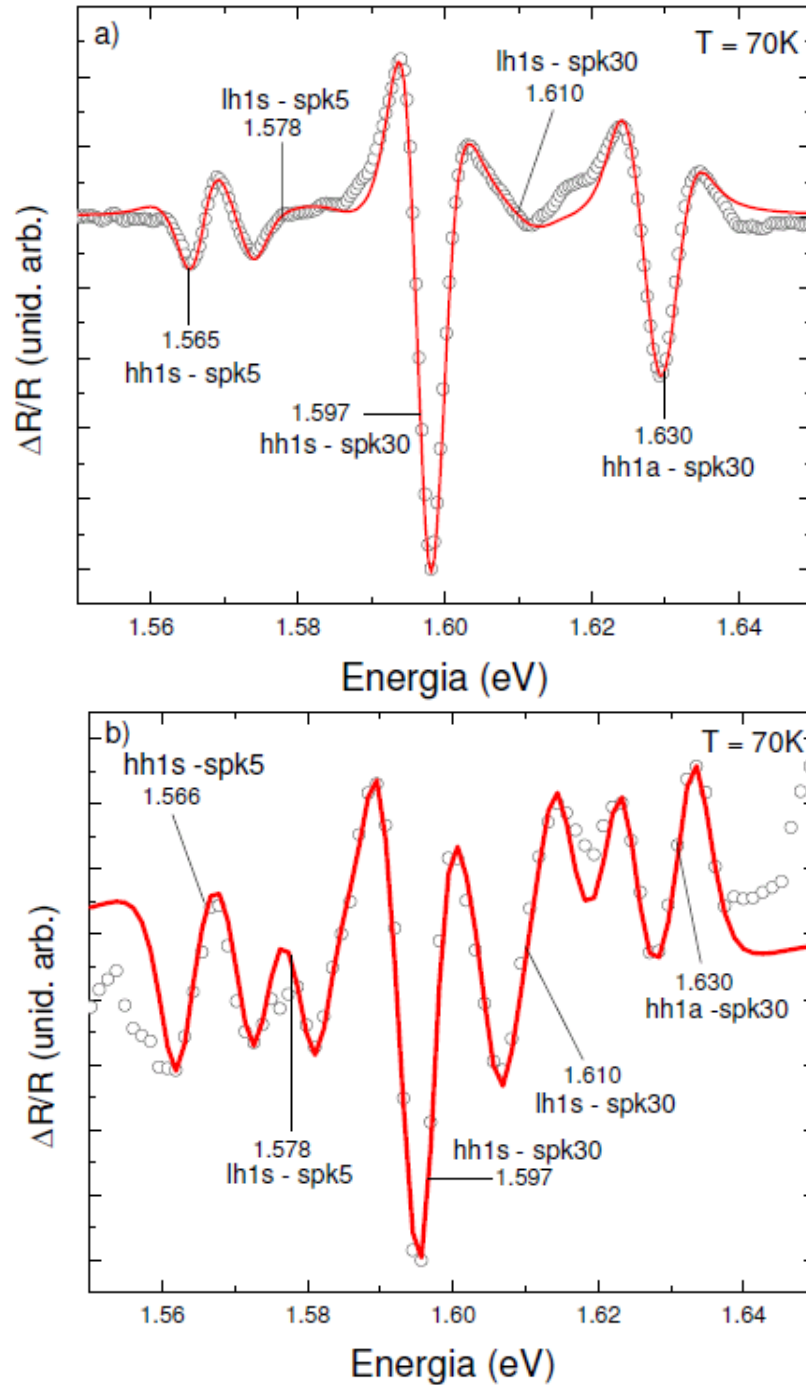


Figura 20 – Espectros de: a) CER a 70 K; b) PR a 70 K, para a amostra #9.

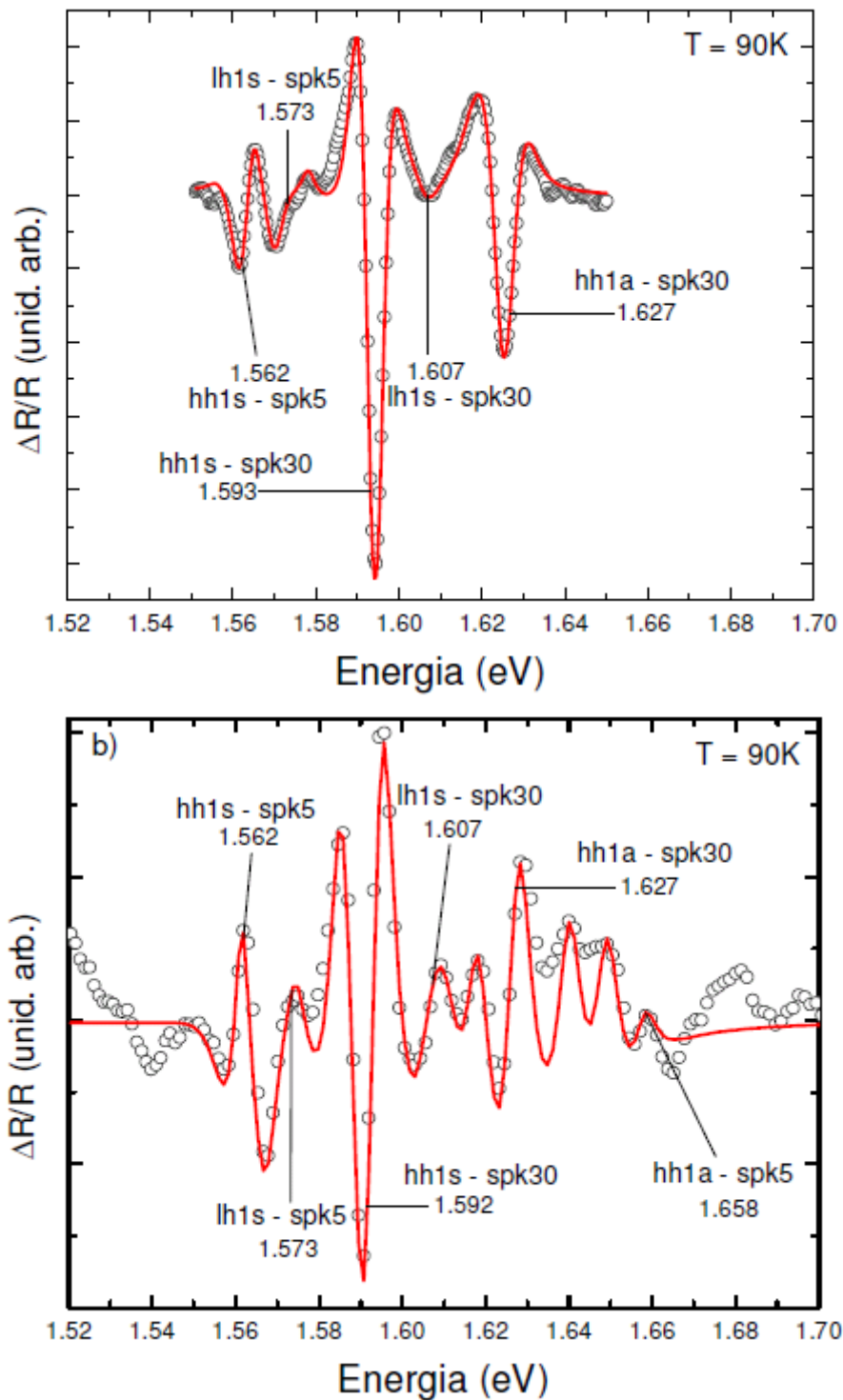


Figura 21 – Espectros de: a) CER a 90 K; b) PR a 90 K, para a amostra #9.

Na Tabela 12 apresentamos os valores das energias de transição excitônica entre diferentes níveis para o PQS e o PQDA com “spike” de 15 \AA obtidas dos espectros de CER e de PR a 70 K e na Tabela 13 a 90 K, referentes à amostra #8. Na Tabela 14 apresentamos os valores das energias de transição excitônica entre diferentes níveis para o

PQDA com “spike” 5 Å e o PQDA com “spike” de 15 Å obtidas dos espectros de CER e de PR a 70 K e na Tabela 15 a 90 K referentes à amostra #9.

Tabela 12 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQS e PQDA com “spike” 15 Å a 70 K.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Temp. (K)</i>	<i>PR (eV)</i>	<i>CER (eV)</i>
PQS	$E_g + e_l + hh_l - E_b$	70	1.554	1.554
PQS	$E_g + e_l + lh_{lB}$	70	1.576	1.577
PQS	$E_g + e_l + lh_l - E_b$	70	1.569	1.569
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	70	1.582	1.583
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	70	1.594	1.595
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	70	X	1.643
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lA} + lh_{lA} - E_b$	70	X	1.679

Tabela 13 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQS e PQDA com “spike” 15 Å a 90 K.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Temp. (K)</i>	<i>PR (eV)</i>	<i>CER (eV)</i>
PQS	$E_g + e_l + hh_l - E_b$	90	1.549	1.549
PQS	$E_g + e_l + lh_{lB}$	90	1.572	1.572
PQS	$E_g + e_l + lh_l - E_b$	90	1.564	1.564
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	90	1.578	1.578
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	90	1.589	1.590
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	90	1.638	1.639
PQDA 15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lA} + lh_{lA} - E_b$	90	1.675	1.675

Tabela 14 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQDA com “spike” 5 Å e PQDA com “spike” 30 Å a 70 K.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Temp. (K)</i>	<i>PR (eV)</i>	<i>CER (eV)</i>
PQDA 5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{IS} + hh_{IS} - E_b$	70	1.566	1.565
PQDA 5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{IS} + lh_{IS} - E_b$	70	1.578	1.578
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{IS} + hh_{IS} - E_b$	70	1.597	1.597
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{IS} + lh_{IS} - E_b$	70	1.610	1.610
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{IA} + hh_{IA} - E_b$	70	1.630	1.630

Tabela 15 – Energias de transição excitônica de CER e PR do PQDA com “spike” 5 Å e PQDA com “spike” 30 Å a 90 K.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>Temp. (K)</i>	<i>PR (eV)</i>	<i>CER (eV)</i>
PQDA 5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$	90	1.562	1.562
PQDA 5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$	90	1.573	1.573
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{1S} + hh_{1S} - E_b$	90	1.592	1.593
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{1S} + lh_{1S} - E_b$	90	1.607	1.607
PQDA 30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{1A} + hh_{1A} - E_b$	90	1.627	1.627

Analisando a Tabela 12 observamos que os valores encontrados para as transições excitônicas $e_{1A}-hh_{1A}$ e $e_{1A}-lh_{1A}$ aparecem somente nos espectros de CER a 70 K e não nos de PR a 70 K. Isto demonstra que para essa temperatura na amostra #8 o espectro de CER apresenta melhores resultados do que o de PR. Comparando os valores de CER com os de PR nas Tabelas 12 e 13 constatamos que os valores diferem no máximo em 1 meV. Com base nessas considerações verificamos que a técnica de CER é altamente confiável, sendo que para certas temperaturas apresenta melhores espectros do que os de PR.

5.5 ENERGIA DE GAP EM FUNÇÃO DE T.

Nas Figs. 31, 32, 33 e 34 apresentamos as energias de “gap” em função da temperatura para o PQS, PQDA “spike” 15 Å, PQDA “spike” 5 Å e PQDA “spike” 30 Å, respectivamente, obtidas após ajustes dos espectros de PR. No item a) de cada figura está apresentado também a curva de PL da energia de “gap” em função da temperatura.

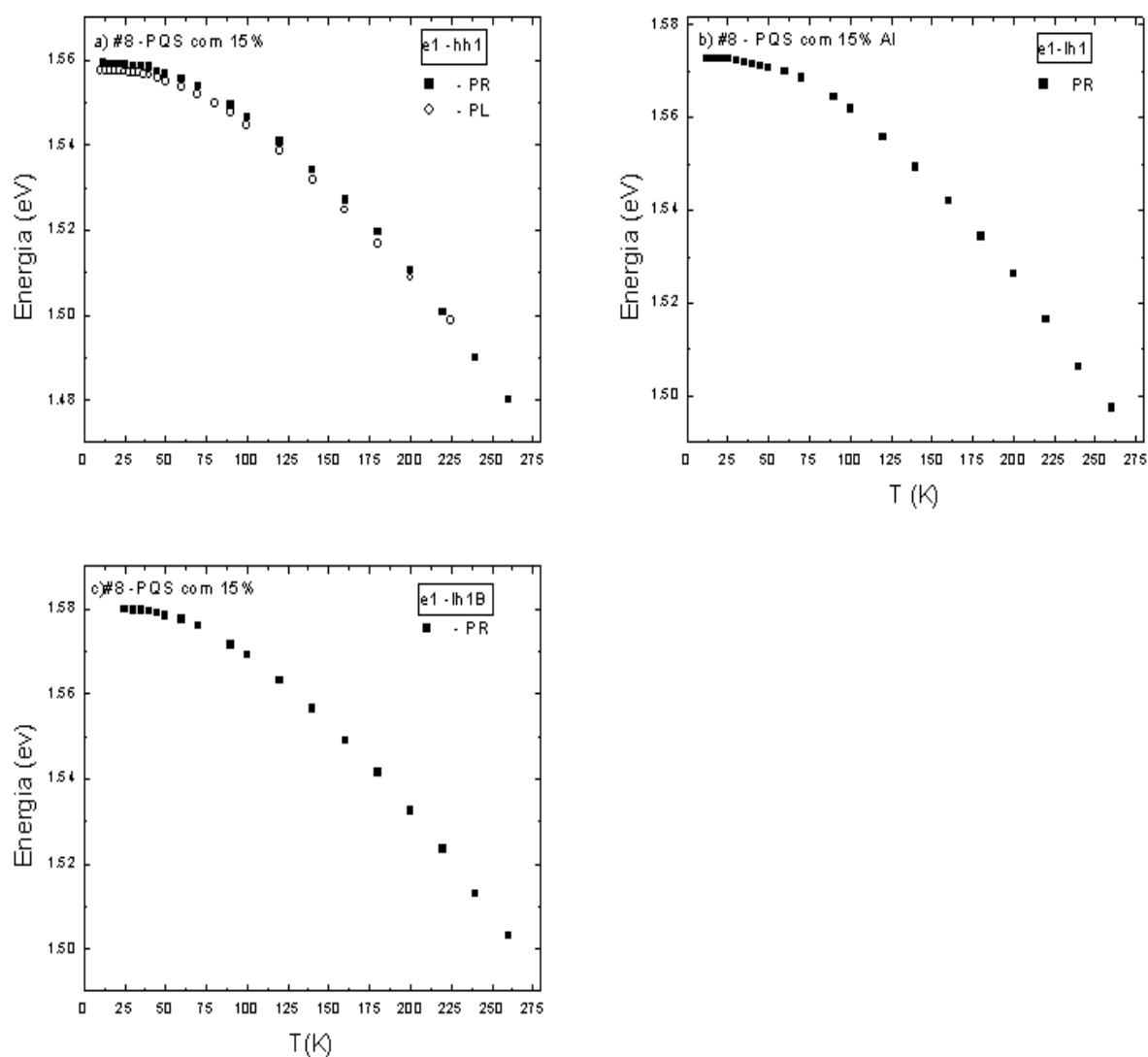


Figura 22 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQS: a) e_1-hh_1 ; b) e_1-lh_1 ; c) e_1-lh_{1B} .

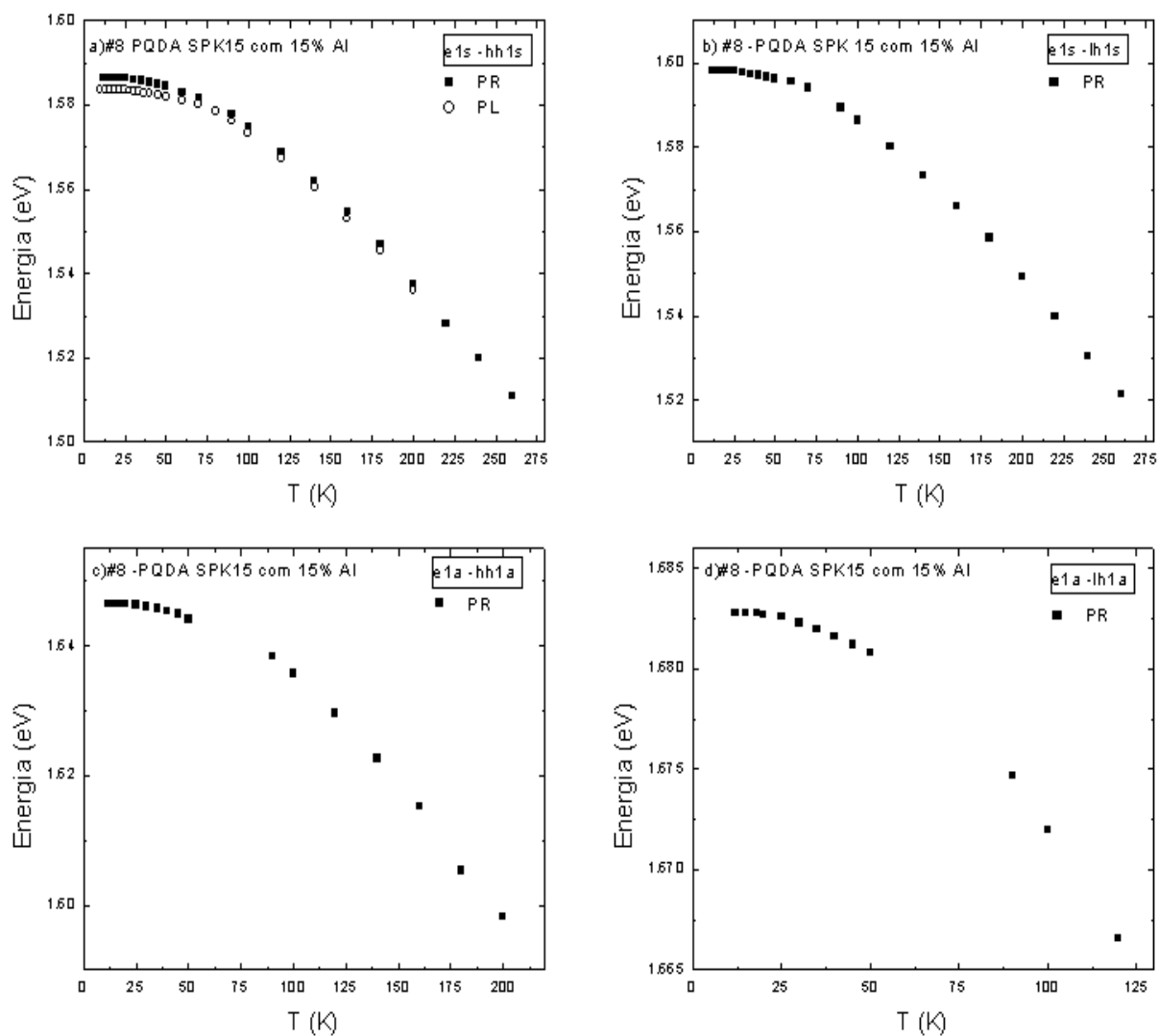


Figura 23 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 15 Å: a) $e_{1s} - hh_{1s}$; b) $e_{1s} - lh_{1s}$; c) $e_{1a} - hh_{1a}$; d) $e_{1a} - lh_{1a}$.

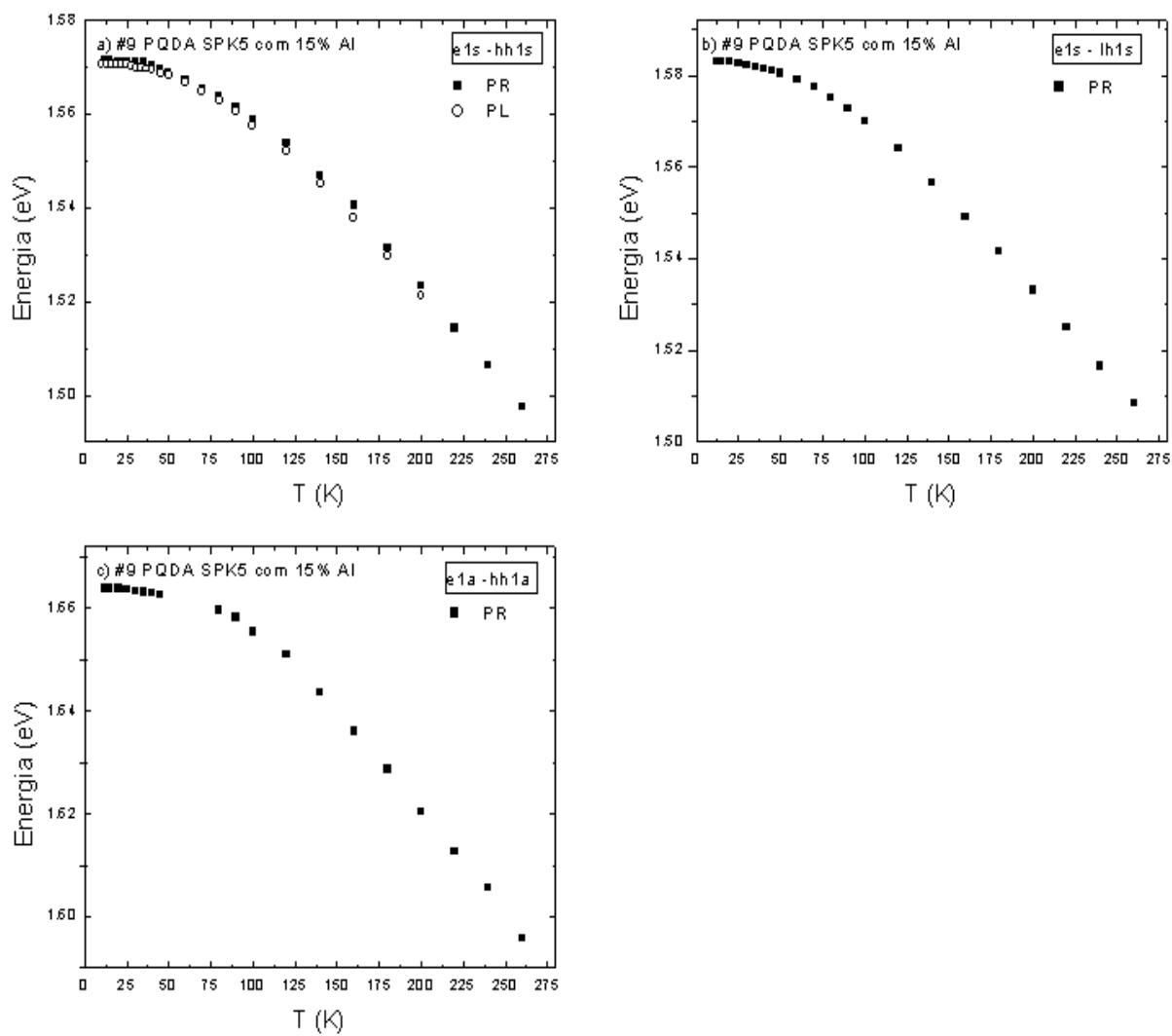


Figura 24 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 5 Å: a) $e_{1s-hh_{1s}}$; b) $e_{1s-lh_{1s}}$; c) $e_{1a-hh_{1a}}$.

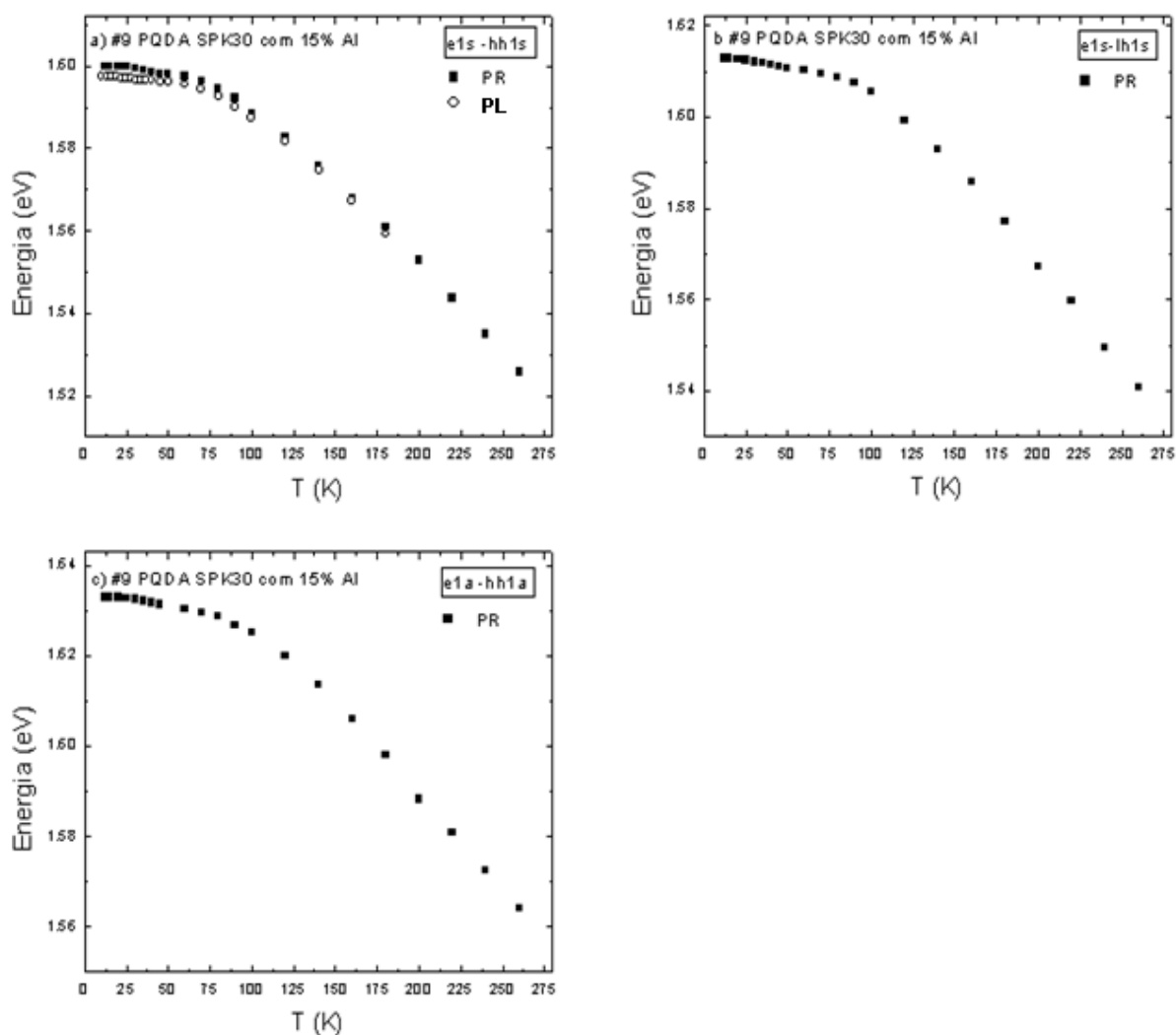


Figura 25 – Energia de “gap” em função da temperatura para o PQDA “spike” 30 Å: a) $e_{1s-hh1s}$; b) $e_{1s-lh1s}$; c) $e_{1a-hh1a}$.

Na Figura 31.c) observamos que os valores da energia de “gap” só aparecem a partir de 25 K, e trata-se de uma transição banda-banda. Nas Figs. 32.c), 32.d), 33.b) e 33.c) não existem valores da energia de “gap” para certas temperaturas; isto ocorreu devido ao fato que não foi possível observar claramente nos espectros de PR as transições referentes a essas temperaturas.

5.6 AJUSTES DAS CURVAS DE $E_G \times T$ PELOS MODELOS DE VIÑA E PASSLER.

O ajuste da curva da dependência do “gap” de energia (ou da transição excitônica) com a temperatura ($E_g(T)$) através das expressões teóricas é importante porque permite saber a energia de “gap” em qualquer temperatura, de maneira simples. Quando esse

ajuste é feito utilizando expressões baseadas em modelos teóricos apropriados, ele também fornece informações importantes a respeito da interação elétron-fônon no material (ou na heteroestruturas) em questão. Desse modo, com a finalidade de comparar o comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição $e_{IS} - hh_{IS}$ com os valores obtidos do trabalho referente ao estudos das propriedades ópticas de PQS e PQDA através da técnica de fotoluminescência^[81] e investigar a dependência desses parâmetros em função da espessura do “spike” nas transições $e_{IS} - lh_{IS}$ e $e_{IA} - hh_{IA}$, foram realizadas os ajustes das curvas experimentais das energias excitônicas relacionadas a essas emissões utilizando as expressões de Viña e de Pässler.

Nas Figs. 35, 36, 37 e 38 apresentamos as energias de “gap” em função da temperatura com os ajustes de Viña e Passler para o PQS, PQDA “spike” 15 Å, PQDA “spike” 5 Å e PQDA “spike” 30 Å, respectivamente.

O modelo de Viña foi escolhido para a realização dos ajustes pois, além de ser um modelo relativamente simples, ele considera apenas a contribuição dos fônons ópticos para a variação da energia de transição excitônica com a temperatura. Já a opção do modelo de Pässler- p se deve a questão de ser um modelo que apresenta 4 parâmetros fornecendo um ajuste melhor para a curva de $(E_g(T))$, além disso, os ajustes realizados com valor do parâmetro p fixo (utilizando-se valores dentro do intervalo para o qual o modelo é considerado adequado^[135]) mostraram que os resultados do comportamento do parâmetros Θ em função da espessura do “spike” tendem aos resultados observados para o parâmetros Θ_B do modelo de Viña, corroborando a utilização do modelo de Viña para o ajuste das curvas de $E_g(T)$ obtidas para nossas heteroestruturas.

Nas Figs. 35, 36, 37e 38 apresentamos as energias de “gap” em função da temperatura com os ajustes de Viña e Passler para o PQS, PQDA “spike” 15 Å, PQDA “spike” 5 Å e PQDA “spike” 30 Å, respectivamente.

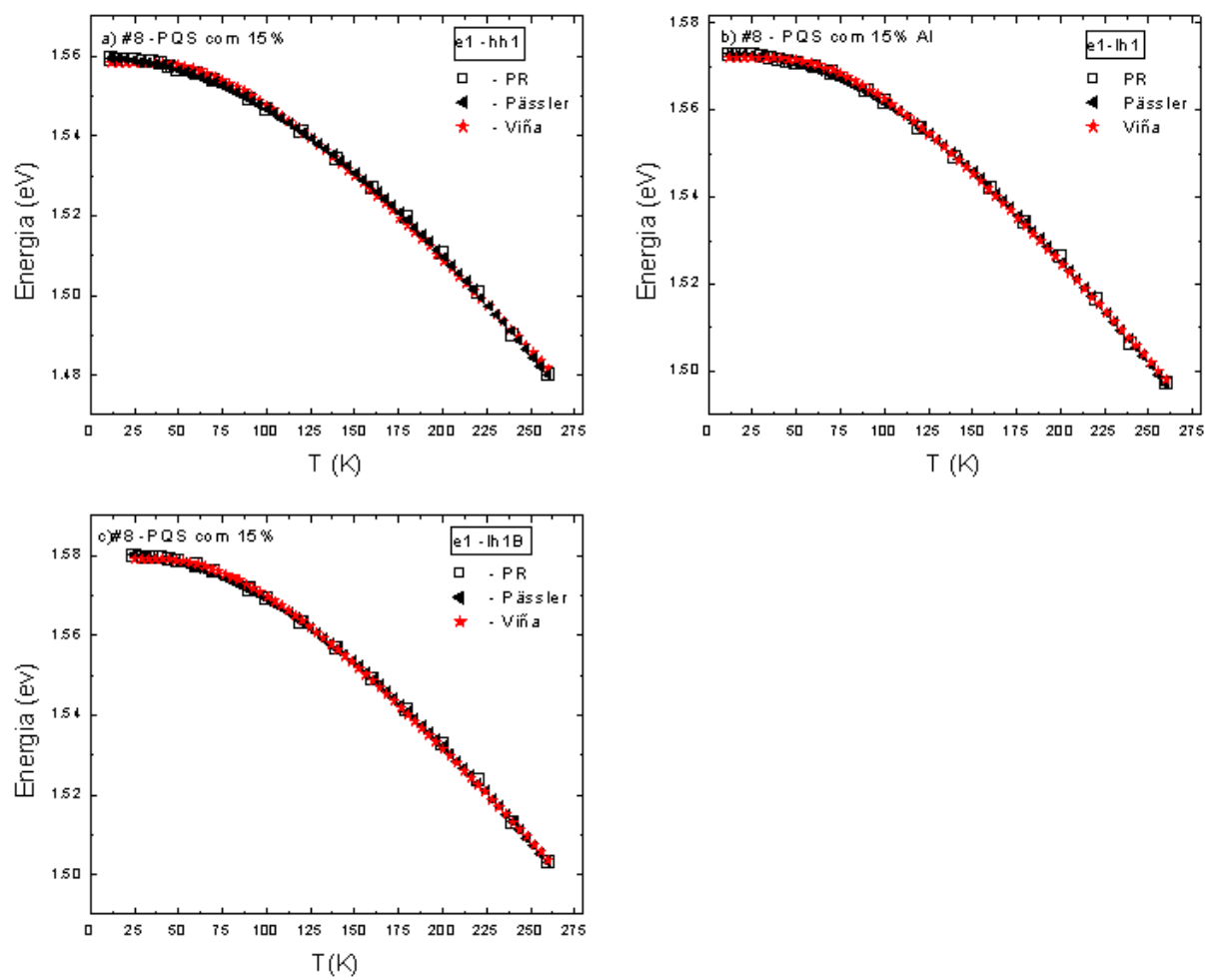


Figura 26 – E_G X T pelos modelos de Viña e Passler para o PQS: a) e_1-hh_1 ; b) e_1-lh_1 ; c) e_1-hh_{1B}

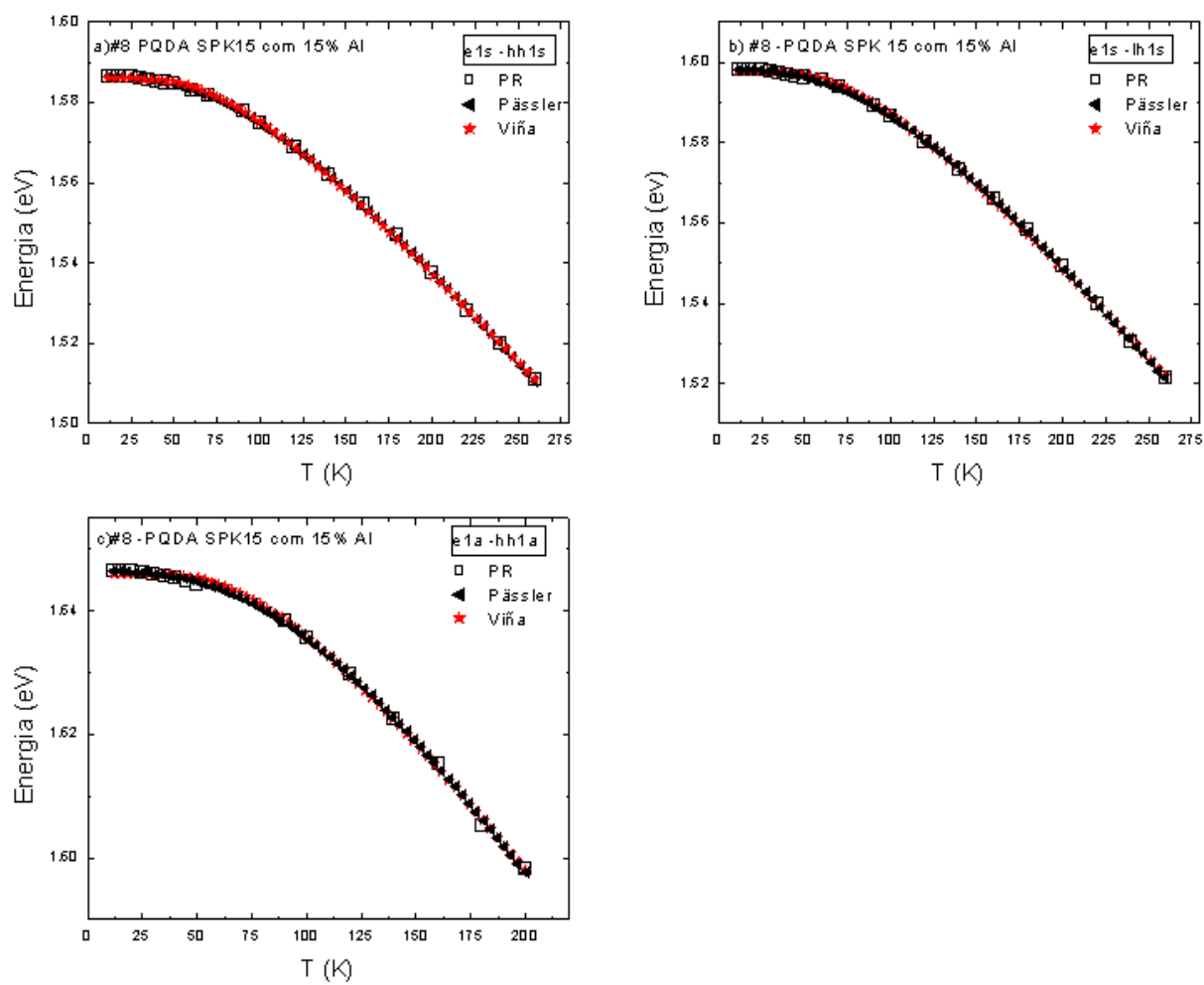


Figura 27 – E_G X T pelos modelos de Viña e Passler para o PQDA “spike” 15 Å: a) $e_{1s} - hh_{1s}$; b) $e_{1s} - lh_{1s}$; c) $e_{1a} - hh_{1a}$.

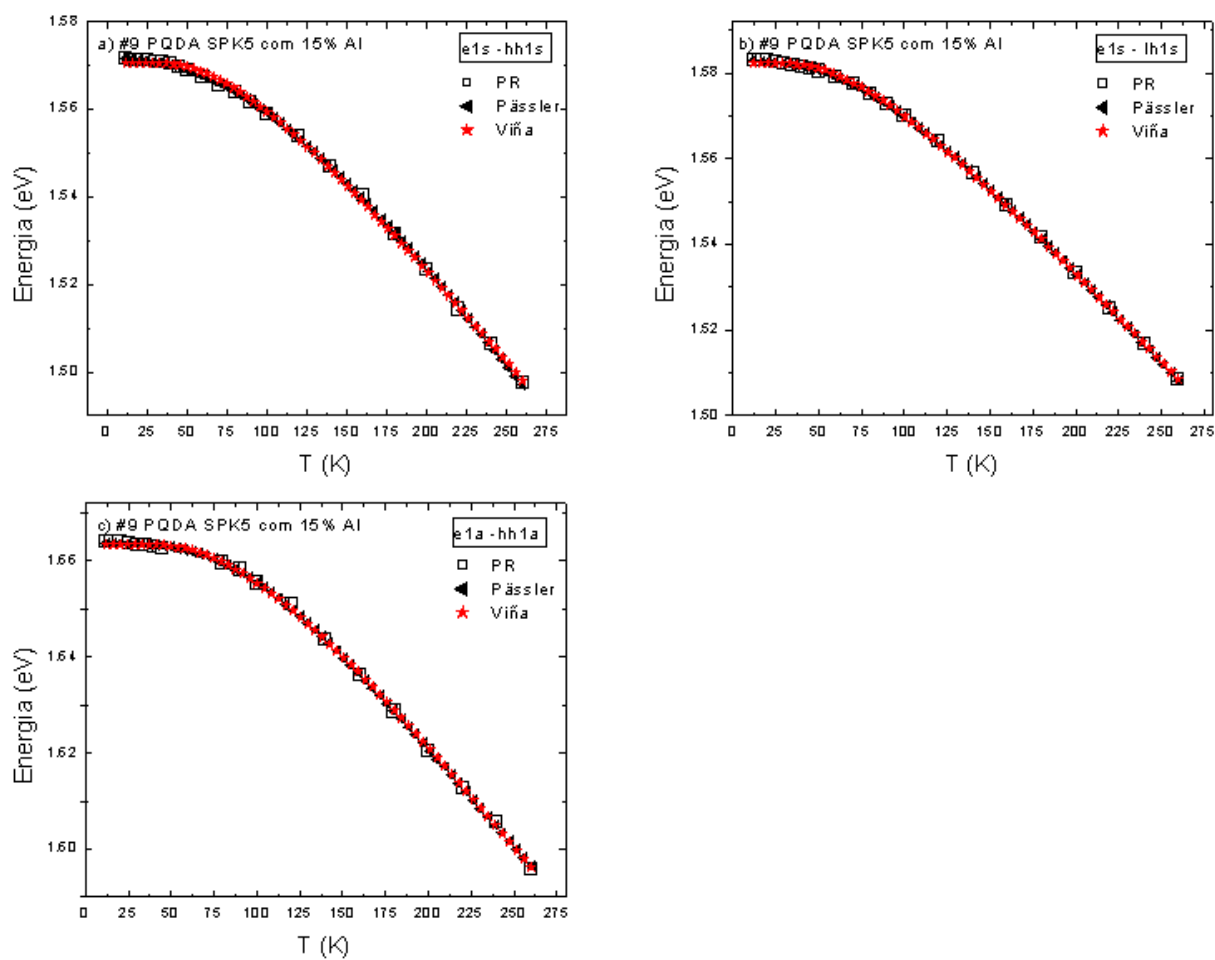


Figura 28 – E_G X T pelos modelos de Viña e Passler para o PQDA “spike” 5 Å: a) $e_{1s}-hh_{1s}$; b) $e_{1s}-lh_{1s}$; c) $e_{1a}-hh_{1a}$.

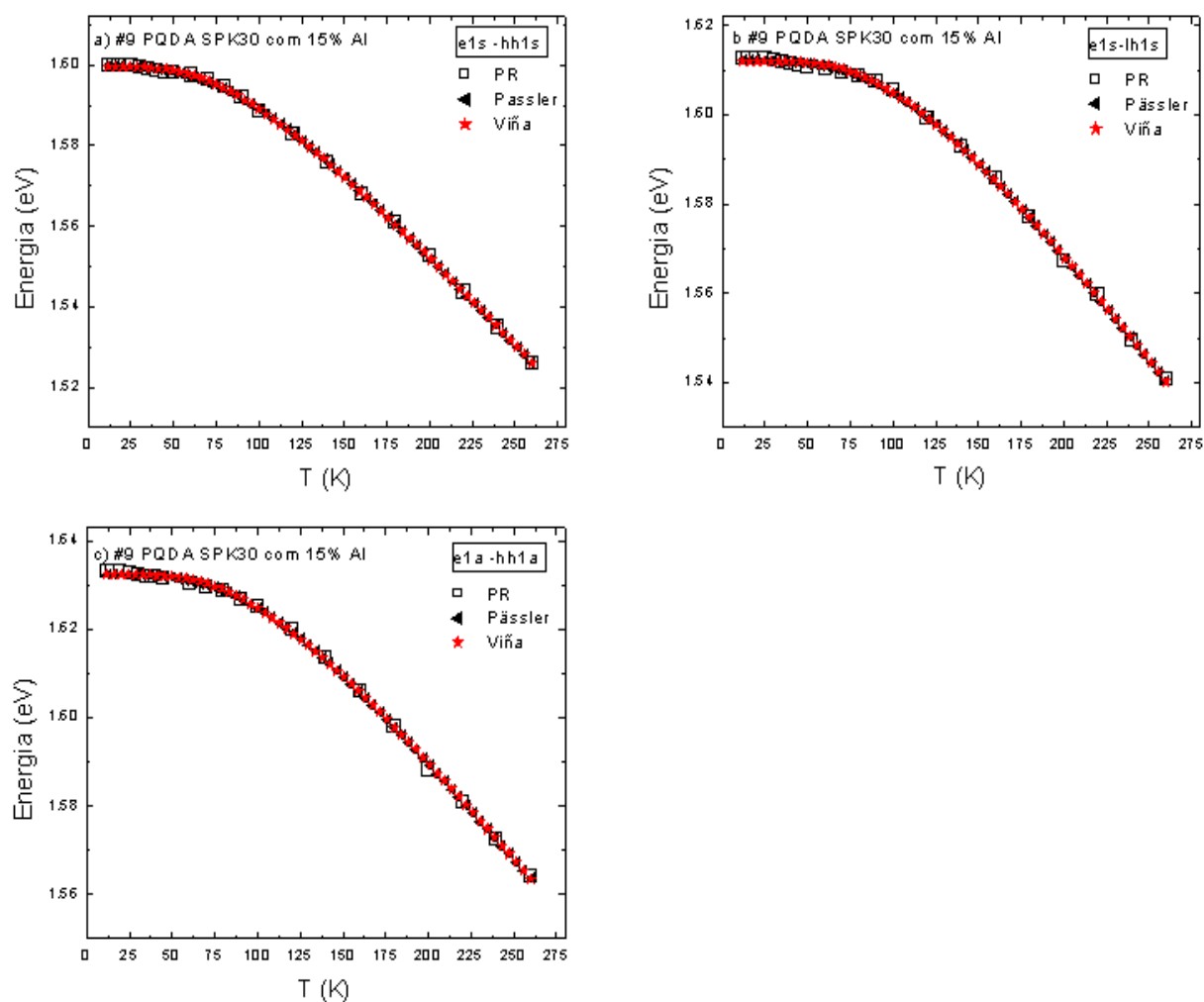


Figura 29 – E_g X T pelos modelos de Viña e Passler para o PQDA “spike” 30 Å: a) $e_{1s}-hh_{1s}$; b) $e_{1s}-lh_{1s}$; c) $e_{1a}-hh_{1a}$.

Nas Tabelas 16 e 17 são apresentados os valores obtidos para os parâmetros de ajuste do modelo de Viña e Passler, respectivamente, através do ajuste das curvas experimentais de $E_g(T)$ de todas as heteroestruturas. Não foi possível efetuar o ajuste da curva experimental $E_g(T)$ da transição excitônica $e_{1a}-lh_{1a}$ referente a PQDA de “spike” 15 Å, porque só foi possível observar essa transição excitônica até a temperatura de 120 K, ou seja, o número de pontos de $E_g(T)$ foi insuficiente.

Tabela 16 – Valores obtidos para os parâmetros de ajuste do modelo de Viña para cada heteroestrutura.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>E_b(eV)</i>	<i>a_B(meV)</i>	<i>Θ_B(K)</i>
PQS	$E_g + e_l + hh_l - E_b$	$1,624 \pm 0,004$	66 ± 5	260 ± 11
	$E_g + e_l + lh_{lB}$	$1,654 \pm 0,003$	75 ± 4	284 ± 8
	$E_g + e_l + lh_l - E_b$	$1,640 \pm 0,003$	68 ± 3	273 ± 8
PQDA5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,624 \pm 0,003$	54 ± 3	236 ± 8
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,630 \pm 0,001$	48 ± 1	217 ± 4
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,732 \pm 0,003$	68 ± 3	288 ± 7
PQDA15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,647 \pm 0,002$	61 ± 2	252 ± 6
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,661 \pm 0,002$	64 ± 2	256 ± 6
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,711 \pm 0,005$	65 ± 5	261 ± 10
PQDA30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,661 \pm 0,002$	61 ± 2	256 ± 6
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,704 \pm 0,004$	92 ± 4	330 ± 9
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,711 \pm 0,004$	78 ± 4	309 ± 9

Tabela 17 – Valores obtidos para os parâmetros de ajuste do modelo de Passler para cada heteroestrutura.

<i>Estrutura</i>	<i>Transição</i>	<i>E_b(eV)</i>	<i>a(μeV/K)</i>	<i>Θ(K)</i>	<i>p</i>
PQS	$E_g + e_l + hh_l - E_b$	$1,559 \pm 0,001$	760 ± 70	503 ± 83	$2,09 \pm 0,07$
	$E_g + e_l + lh_{lB}$	$1,581 \pm 0,001$	610 ± 30	337 ± 34	$2,38 \pm 0,10$
	$E_g + e_l + lh_l - E_b$	$1,573 \pm 0,001$	570 ± 30	310 ± 26	$2,48 \pm 0,10$
PQDA5 (Lb = 5 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,571 \pm 0,001$	520 ± 20	281 ± 28	$2,34 \pm 0,11$
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,583 \pm 0,001$	440 ± 50	195 ± 5	$2,77 \pm 0,06$
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,664 \pm 0,002$	420 ± 10	206 ± 9	$3,81 \pm 0,31$
PQDA15 (Lb = 15 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,587 \pm 0,001$	500 ± 10	242 ± 11	$2,68 \pm 0,09$
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,598 \pm 0,001$	520 ± 10	247 ± 13	$2,69 \pm 0,10$
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,646 \pm 0,002$	530 ± 50	250 ± 40	$2,81 \pm 0,26$
PQDA30 (Lb = 30 Å)	$E_g + e_{lS} + hh_{lS} - E_b$	$1,600 \pm 0,002$	460 ± 10	209 ± 11	$3,11 \pm 0,19$
	$E_g + e_{lS} + lh_{lS} - E_b$	$1,612 \pm 0,001$	500 ± 20	241 ± 14	$3,60 \pm 0,27$
	$E_g + e_{lA} + hh_{lA} - E_b$	$1,633 \pm 0,001$	460 ± 20	228 ± 12	$3,60 \pm 0,27$

Os parâmetros de Pässler não serão analisados, porém é importante enfatizar que através dos valores da Tabela 15 é possível determinar uma expressão analítica para qualquer temperatura. Além disso, os dados do modelo de Pässler fornecem um melhor ajuste para a curva de $E_g(T)$, podendo ser utilizados como material de consulta para trabalhos futuros em estudos que requeiram o valor de E_g em qualquer temperatura do intervalo estudado.

5.6.1 Análise dos Parâmetros a_B e Θ_B do Modelo de Viña em Função da Espessura do “Spike”.

5.6.1.1 Transição $e_{1S}-hh_{1S}$

Na Figura 39 é mostrado o comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña para a transição $e_{1S}-hh_{1S}$, em função da espessura do “spike”, obtidos através da técnica de PR e PL, sendo que os dados obtidos por PL foram retirados de um trabalho anterior^[81]. Os valores dos parâmetros a_B e Θ_B correspondem à intensidade da interação elétron-fônon e à energia média dos fônons para o modelo de Viña, respectivamente.

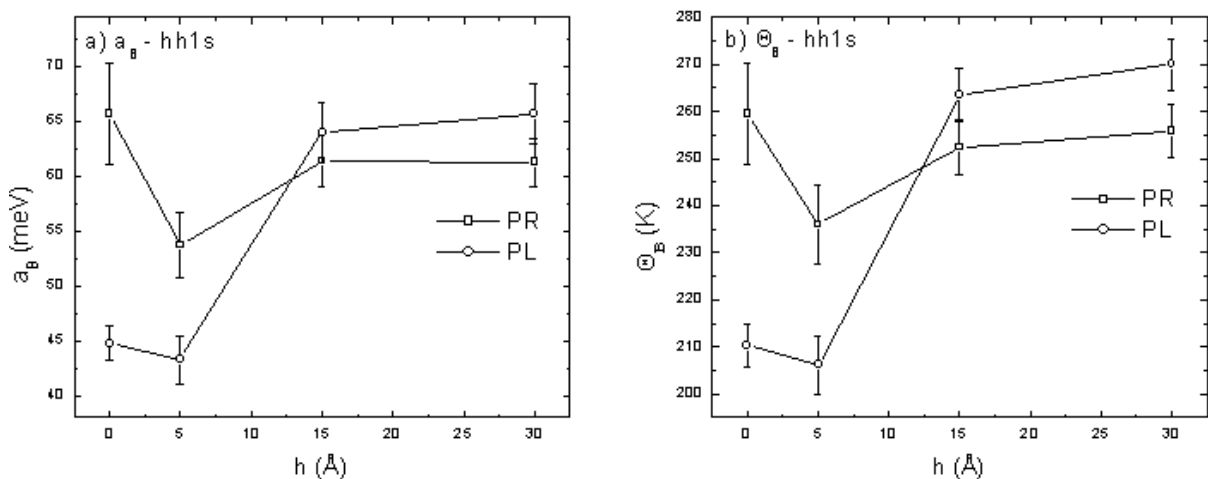


Figura 30 – Comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição $e_{1S}-hh_{1S}$: a) a_B eb) Θ_B .

Observa-se, na Figura 39, que os valores dos parâmetros a_B e Θ_B apresentam aproximadamente o mesmo comportamento relativo, com o aumento da espessura do “spike” para PL e para PR. Entretanto, os valores de a_B e de Θ_B para o PQS e para o PQDA de “spike” 5 Å diferem muito de uma técnica para outra, ao passo que os parâmetros para os PQDAs de “spike” 15 Å e 30 Å apresentam valores próximos, indicando um comportamento semelhante entre as duas técnicas. A análise do comportamento dos parâmetros, de cada transição, em função da espessura do “spike” será dividida em três etapas, considerando a variação nos valores dos parâmetros quando se passa: *i*) do PQS para o PQDA5 (PQDA5); *ii*) do PQDA5 para o PQDA15 (PQDA15) e *iii*) do PQDA15 para o PQDA30 (PQDA30). Apesar dos valores dos parâmetros obtidos para algumas heteroestruturas apresentarem uma incerteza comparável à variação dos mesmos quando se passa de uma heteroestrutura para outra, a análise será realizada considerando-se a tendência do comportamento dos parâmetros.

***i*) PQDA5**

Quando se passa do PQS para o PQDA5 há uma redução nos valores dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña.

Analisando a literatura, observa-se que existem muitos trabalhos que relatam que a inserção de uma barreira estreita (“spike”) no centro de um PQS provoca uma diminuição na interação elétron - fônon. A maioria dos trabalhos foi focada no estudo de PQS com “spikes” através da análise da mobilidade eletrônica^[82,83], a qual é relacionada ao inverso da interação elétron-fônon^[82,84].

Zhu e colab.^[82], através do estudo da mobilidade Hall em heteroestruturas de GaAs/AlAs, observaram experimentalmente uma redução na interação elétron-fônon quando 3 barreiras de 4 monocamadas (MC) de AlAs eram inseridas no interior de um PQS.

Wang e colab.^[85] calcularam a mobilidade eletrônica em PQDAs de GaAs/AlAs em função da espessura do “spike” e observaram que em PQDAs com mini-poços de 40 Å de largura o máximo da mobilidade é encontrado para um “spike” de aproximadamente 5 Å de espessura (Figura 40).

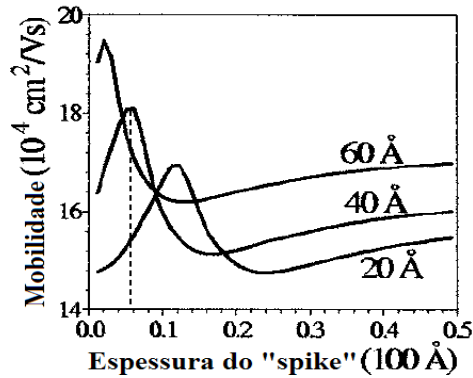


Figura 31 – Dependência da mobilidade eletrônica em função da espessura do “spike” para PQDA de GaAs/AlAs com mini-poços de diferentes larguras^[72]. Para mini-poços de 40 Å de largura a mobilidade alcança o máximo para um “spike” de aproximadamente 5 Å de espessura.

Muitos trabalhos teóricos utilizam o modelo do dielétrico contínuo^[82]. Neste modelo, cada camada da heteroestrutura é substituída por um meio dielétrico caracterizado por uma função dielétrica que depende da frequência de oscilação do meio, proporcionando dois tipos de modos para fônons: os modos confinados e os modos de interface. Os modos confinados possuem amplitudes somente em uma das camadas e frequência dos fônons LO e TO do material “bulk” em questão. Já os modos de interface possuem frequência fortemente dependente do vetor de onda e amplitude em ambas as camadas, decaindo exponencialmente a partir das interfaces (Figura 41)^[82].

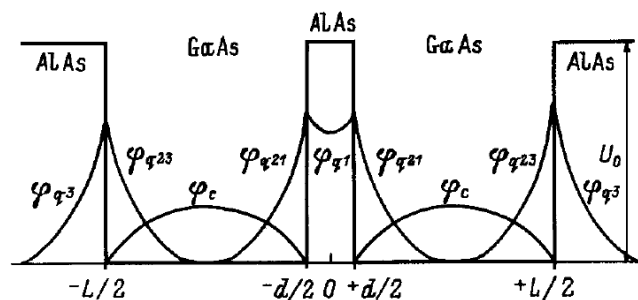


Figura 32 – Poço quântico de GaAs/AlAs contendo um “spike” de AlAs no centro da estrutura. As funções de onda dos fônons de interface (φ_q) e dos fônons confinados (φ_c) são mostradas esquematicamente^[86].

Segundo Pozela e colab.^[87,88], o aumento da mobilidade eletrônica (e a redução na interação elétron-fônon) observado com a inserção de um “spike” estreito no centro de um PQS se deve à redução na interação com os modos confinados no material do poço (devido ao surgimento de nós nas funções de onda associadas a esses fônons); essa

redução não seria compensada pela interação com os modos provenientes das interfaces adicionais, devido ao fato dos elétrons não interagirem com dois desses modos, os quais apresentam coeficiente de acoplamento elétron-fônon igual a zero^[87,88].

A interação dos elétrons com os modos confinados no material do “spike” pode ser considerada desprezível para “spikes” estreitos com base nos seguintes resultados:

i) Sapega e colab.^[89] calcularam as relações de dispersão para fônons ópticos em heteroestruturas de poços quânticos múltiplos (MQW – do inglês “multiple quantum wells”) de GaAs/AlAs com poços de 40 Å de largura e barreiras de 5 Å e observaram a existência de apenas 2 modos confinados na região das barreiras e *ii)* Sun e colab.^[90], estudando MQW de GaAs/AlGaAs com poços de 50 Å de largura e barreiras de 5 Å de espessura, não observaram sinal Raman dos modos relacionados às barreiras de AlGaAs.

Dessa forma, embasados nos resultados apresentados anteriormente, pode-se concluir que a redução nos valores dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña para o PQDA5 em relação ao PQS pode ser explicada pela redução na interação dos elétrons com os modos de fonons confinados. A redução na interação dos elétrons com modos de fônons confinados no material do poço é atribuída ao surgimento de nós nas funções de onda dos fônons nas interfaces com o “spike” (Figura 41). Esses nós reduzem a sobreposição (“overlap”) das funções de onda dos elétrons (Figura 42) com as funções de onda dos fônons confinados no material do poço. Como a interação dos elétrons com os modos de fônons de interface, provenientes das interfaces adicionais, não é suficiente para compensar esse efeito, a interação elétron-fônon total é reduzida, provocando a redução nos valores dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña.

Há de se destacar o fato de que neste trabalho, a redução na interação elétron-fônon com a inserção de um “spike” estreito no interior de um PQS foi observada através da análise dos parâmetros de ajuste do modelo de Viña, utilizado para ajustar a curva experimental de $E_g(T)$ obtida através de medidas de PR, concordando com o comportamento apresentado por PL, enquanto que os demais trabalhos constataram esta redução na interação elétron-fônon através das medidas ou cálculos da mobilidade eletrônica.

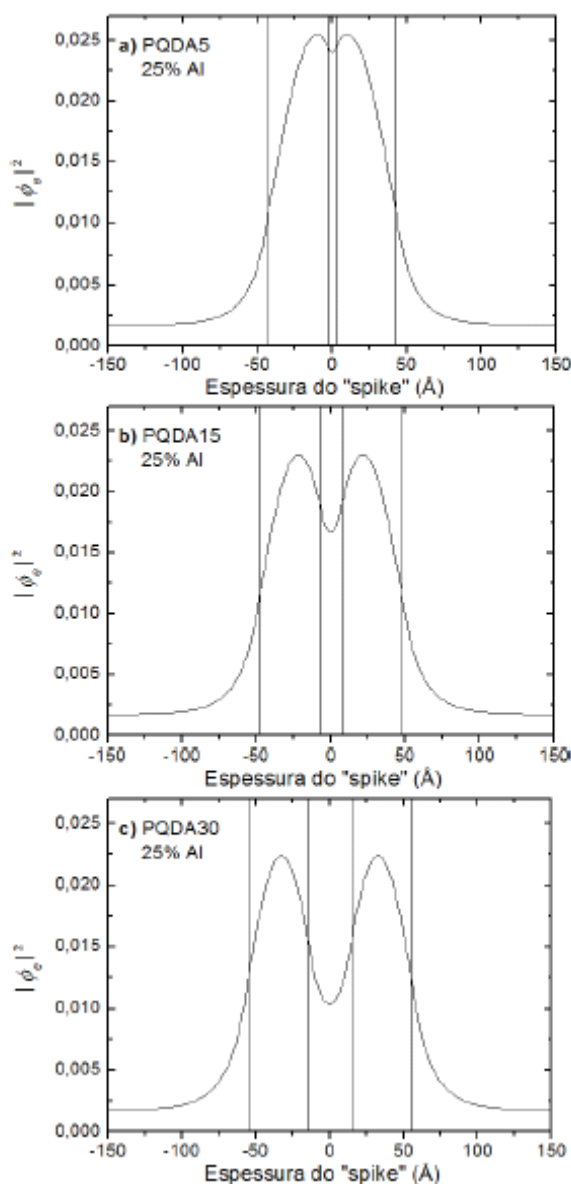


Figura 33 – $|\phi_e|^2$ para os PQDAs com $x = 0,25$: (a) PQDA5; (b) PQDA15 e (c) PQDA30. Para as heteroestruturas com $x = 0,15$ e $0,35$ o efeito geral é semelhante. Esses resultados foram obtidos através da utilização do “software” QWS (“Quantum Well Solver”) versão 2.0^[91], desenvolvido por Roberto Yuji Tanaka e colaboradores no IEAv (Instituto de Estudos Avançados – São José dos Campos).

ii) PQDA15

Quando se passa do PQDA5 para o PQDA15 os valores dos parâmetros a_B e θ_B do modelo de Viña aumentam.

Para o PQDA15 existem mais modos de fônons confinados no interior do “spike”, com relação ao PQDA5^[89]. Por outro lado, o $|\phi_e|^2$ (onde ϕ_e é a função de onda eletrônica) passa a apresentar um mínimo cada vez menor no centro do “spike” à medida que

a espessura do mesmo aumenta (Figura 42), o que reduz a probabilidade dos elétrons interagirem com os modos de fônons confinados no “spike”. No entanto, é provável que o resultado efetivo seja um aumento na interação dos elétrons com os modos confinados no “spike”, relativamente ao PQDA5. Além disso, como mostrado na Figura 42, o aumento da espessura do “spike” desloca os máximos do $|\phi_e|^2$ para o centro dos mini-poços, permitindo que os elétrons interajam de maneira mais eficiente com os modos de fônons confinados na região dos mini-poços. Outro efeito a ser considerado é o fato de que, com o aumento na espessura do “spike”, o coeficiente de acoplamento dos elétrons com os fônons de interface do “spike” passa a assumir valores diferentes de zero^[87,88], tornando essa interação significativa para o efeito total na interação elétron-fônon.

Assim, o aumento nos valores dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña, observado quando se passa do PQDA5 para o PQDA15, pode ser atribuído ao aumento na interação dos elétrons com os modos de fônons confinados nos mini-poços e nos “spikes” e com os modos de interfaces associados às interfaces dos “spikes”. Vale ressaltar que, com o aumento da espessura do “spike”, o aumento na interação elétron-fônon já havia sido predito teoricamente^[92].

iii) PQDA30

Quando se passa do PQDA15 para o PQDA30 os valores dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña não sofrem uma variação significativa.

Para o PQDA30 existem mais modos de fônons confinados no interior do “spike”, com relação ao PQDA15^[89], mas, como o $|\phi_e|^2$ apresenta valores menores na região do “spike” (Figura 42), deve haver praticamente uma manutenção na interação dos elétrons com os modos de fônons confinados no “spike”. Deve haver também um pequeno aumento na interação dos elétrons com os modos de fônons confinados nos mini-poços (devido ao deslocamento do máximo do $|\phi_e|^2$ (Figura 42)). No entanto, deve haver uma diminuição na interação dos elétrons com os modos de interfaces associados às interfaces dos “spikes”, devido à diminuição de $|\phi_e|^2$ nas interfaces dos “spikes”. Pode-se dizer que há uma compensação que faz com que a interação elétron-fônon e a energia dos fônons estabilizem em um determinado valor para espessuras de “spike” suficientemente grandes (acima de 15 Å). Sapega e colab.^[89] também observaram uma tendência de estabilização com relação ao

comportamento da energia do fônon em função da espessura do “spike” em seus MQW de GaAs/AlAs.

5.6.1.2 Transições $e_{IS}-lh_{IS}$ e $e_{IA}-lh_{IA}$

Simplemente com o intuito de fornecer os resultados experimentais para análise futura, mostramos nas Figuras 43 e 44 o comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña, para a transição e_I-lh_{IS} e $e_{IA}-lh_{IA}$, respectivamente, em função da espessura do “spike”, obtidos através da técnica de PR.

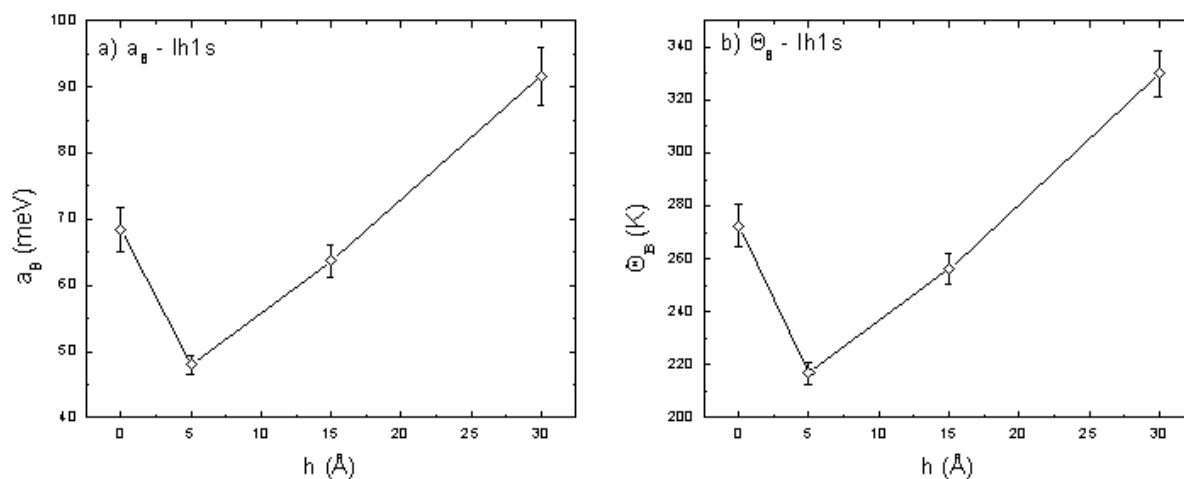


Figura 34 - Comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição e_I-lh_{IS} : a) a_B ; b) Θ_B .

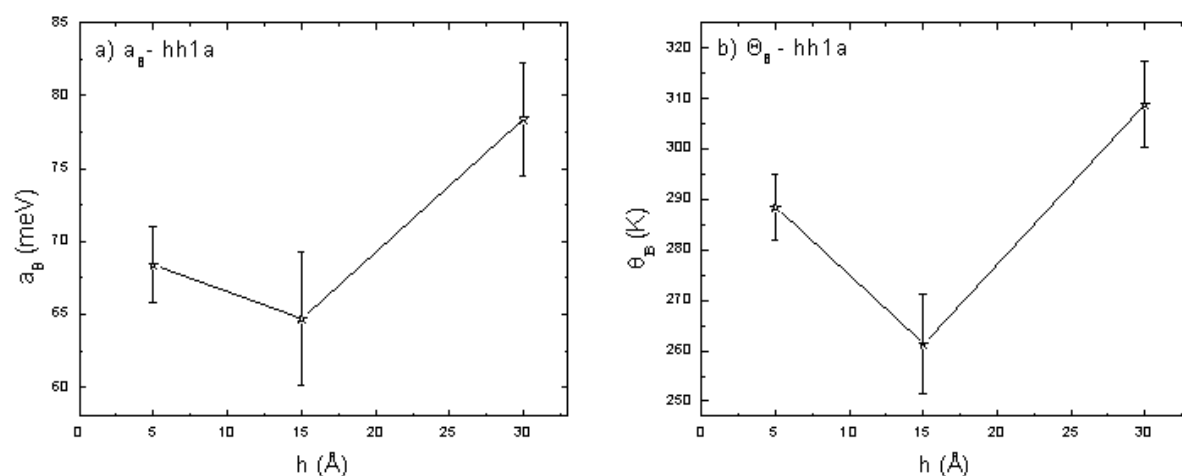


Figura 35 – Comportamento dos parâmetros a_B e θ_B do modelo de Viña em função da espessura do “spike” para a transição e_{1A} - hh_{1A} : a) a_B ; b) θ_B .

A transição $e_{1A} - hh_{1A}$ não apresenta valores para o PQS (“spike” nulo), porque não foi possível observar nos espectros de PR a transição referente ao primeiro nível excitado do PQS.

Para a análise dos parâmetros dessas transições em função da espessura do “spike” teríamos que ter os cálculos das funções de onda dos elétrons para os níveis lh_{1S} , e_{1A} e hh_{1A} , o que não foi realizado nessa etapa, ficando como sugestão para um próximo trabalho.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho foram estudadas as transições ópticas do nível fundamental (e_1-hh_1 e e_1-lh_1) do PQS e dos níveis fundamental e excitados de PQDAs de GaAs/ $Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ com diferentes espessuras de “spikes”, através das técnicas de PR e de CER, em função da temperatura. Com essa intenção foi montado um sistema de eletrorefletância sem contato (CER) e também foi utilizado um sistema de fotorefletância (PR) para a realização das medidas. As medidas foram realizadas em duas amostras, cada uma contendo duas heteroestruturas diferentes formadas por poços (ou mini-poços) de GaAs e barreiras e “spikes” de $Al_{0,15}Ga_{0,85}As$. A amostra #8 contém um PQS e um PQDA com “spike” de 15 Å de espessura e a amostra #9 contém dois PQDAs, um com “spike” de 5 Å de espessura e outro com “spike” de 30 Å de espessura. Os PQS têm 80 Å de largura, enquanto os mini-poços que formam os PQDAs têm 40 Å de largura.

A seguir, será apresentado um resumo das principais atividades realizadas no desenvolvimento deste trabalho, seus resultados e conclusões principais:

i) Cálculo dos níveis de energia de elétrons e buracos envolvidos em todas as transições possíveis de ser observadas. Os cálculos para os níveis de energia dos portadores em PQS e PQDA foram realizados com base no formalismo de função envelope.

ii) Cálculo da energia de ligação excitônica e das energias de transição possíveis para o PQS e PQDA. A energia de ligação excitônica para o PQS foi calculada através do modelo MLC para o espaço dimensional fracionário e para o PQDA calculou-se utilizando a aproximação proposta por Zhao e colab. para o tratamento de um PQDA como um PQS, permitindo então a utilização do modelo MLC. Os valores obtidos através desses cálculos foram utilizados para a identificação das recombinações excitônicas do nível fundamental e níveis excitados, nos espectros obtidos através da técnica de PR à baixas temperaturas. De uma maneira geral, os resultados teóricos para as recombinações excitônicas ficaram próximos dos resultados experimentais ajustados (Tabelas 10 e 11). A maior diferença foi observada para o PQDA30 na transição $e_{1A}-hh_{1A}$ (6 meV). Diversos fatores podem servir como fontes para as diferenças observadas entre os resultados teóricos e experimentais, como, por exemplo, os parâmetros utilizados para alimentar os cálculos teóricos, a ausência de correções adicionais relevantes para o cálculo da energia de ligação excitônica, a variação na composição química da liga, etc.. Contudo, é possível concluir que as metodologias teóricas utilizadas para o cálculo dos níveis de energia e da energia de

ligação excitônica em PQS e PQDAs fornecem bons resultados, sendo adequadas para a identificação de transições excitônicas observadas nesses tipos de sistemas.

iii) Montagem experimental da técnica de CER. A montagem da técnica de CER foi totalmente desenvolvida no Laboratório de Óptica e Optoeletrônica da UEL. Foram realizadas medidas de CER para amostra #8 entre 66K e 168K e para amostra #9 entre 66K e 134K. O fato do menor valor do intervalo das medidas ser de 66K está justificado no Capítulo 4 subitem 4.4.1. Os valores de CER a 70K e 90K ficaram muito próximos dos valores de PR, diferindo de no máximo em 1meV (Tabelas 12 e 13). A 70 K os valores encontrados para as transições excitônicas $e_{IA}-hh_{IA}$ e $e_{IA}-lh_{IA}$ aparecem somente nos espectros de CER não nos de PR. Isto demonstra que para essa temperatura na amostra #8 o espectro de CER apresenta melhores resultados do que o de PR. Dessa forma é possível concluir que a técnica de CER é uma técnica confiável e que, com os devidos ajustes a fim de ampliar a faixa de temperatura sobre a amostra no interior do criostato, pode ser utilizada para se obter energias de transição excitônicas em função da temperatura em diferentes heteroestruturas.

iv) Foram determinadas, em função da temperatura, as energias (E_P) das seguintes transições excitônicas: e_I-hh_I e e_I-lh_I do poço simples e $e_{IS}-hh_{IS}$, $e_{IS}-lh_{IS}$ e $e_{IA}-hh_{IA}$ dos poços duplos. Aqui é importante lembrar que a técnica de fotoluminescência não permite obter as transições dos níveis excitados, devido ao fato dos elétrons (e buracos) desses níveis decaírem para o nível fundamental através da emissão de fônons, antes deles se recombinarem radiativamente. Assim, por PL só observa a transição entre os estados fundamentais e_I-hh_I e em alguns casos, a temperaturas altas, a transição e_I-lh_I . Também não é possível obter espectros de absorção devido ao fato da luz incidente ser absorvida pelo substrato de GaAs.

v) Comparação das curvas de $E_g(T)$ entre PR e PL para a transição $e_{IS}-hh_{IS}$. Observou-se uma diferença de 2 a 3 meV entre os valores de PL e PR referentes a recombinação excitônica do nível fundamental. Esta diferença pode ser explicada pelas características de cada técnica: enquanto os resultados de PR estão associados diretamente com a absorção, na PL, após a absorção da radiação pelos portadores, os mesmos relaxam não radiativamente, através de emissão de fônons, para os estados de menor energia, de onde recombinam emitindo a radiação detectada. No caso de haver flutuações de potencial (devido às flutuações nas larguras dos poços ou na concentração da liga), essas flutuações geram uma distribuição de estados de energia logo abaixo da energia de “gap”, no caso da recombinação banda –banda, ou da energia de transição excitônica, no caso da recombinação excitônica;

dessa maneira na PL os portadores relaxam para esses estados, antes de recombinar e, assim, acabam emitindo radiação de energia inferior à da radiação absorvida.

vi) Estudo do comportamento da interação elétron – fônon em função da espessura do “spike” através da análise dos parâmetros extraídos a partir do ajuste das curvas experimentais da variação da energia de transição excitônica com a temperatura por meio dos modelos de Viña e Pässler.

Dos espectros de PR em função da temperatura, foi possível construir as curvas experimentais da dependência da transição excitônica com a temperatura ($E_g(T)$), as quais foram ajustadas através dos modelos de Viña e Pässler. A partir dos ajustes do modelo de Viña foram extraídos os valores dos parâmetros a_B e Θ_B , relacionados à interação elétron-fônon (IEF) para as transições $e_{1S} - hh_{1S}$ e $e_{1S} - lh_{1S}$ em cada heteroestrutura e $e_{1A} - hh_{1A}$ para os PQDAs. Através dos ajustes do modelo de Pässler foram obtidos os parâmetros α , Θ e p , os quais não foram analisados, apenas relacionados (Tabela 15).

Para a transição $e_I - hh_I$, ao se passar de uma heteroestrutura para outra (aumentando-se a espessura do “spike”), os valores dos parâmetros apresentaram os seguintes comportamentos: *i)* do PQS para o PQDA5 observou-se uma redução nos valores dos parâmetros, *ii)* do PQDA5 para o PQDA15 os valores dos parâmetros sofreram um aumento e *iii)* do PQDA15 para o PQDA30 não foram observadas variações significativas nos valores dos parâmetros. Esses resultados estão coerentes com os resultados obtidos anteriormente por Mantovani^[81] utilizando a técnica de PL .

Para as transições $e_{1S} - lh_{1S}$ e $e_{1A} - hh_{1A}$ são apenas apresentados o comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B em função da espessura do “spike” devido ao fato de não termos calculado as funções de onda dos elétrons para esses níveis. Porém observamos que há uma diferença do seu comportamento quando comparada com a transição $e_{1S} - hh_{1S}$, o que podemos atribuir ao fato das funções de onda eletrônicas associadas a esses níveis terem um perfil diferente daquele das funções associadas aos níveis fundamentais.

De uma maneira geral o comportamento dos parâmetros a_B e Θ_B do modelo de Viña em função da espessura do “spike” pode ser explicada por alterações na interação dos elétrons com os diferentes modos de fônons existentes nas heteroestruturas.

Os resultados obtidos neste trabalho indicam uma série de extensões. A seguir são listadas algumas delas:

1) Melhorar a isolamento elétrica e a condução térmica entre a célula de CER e o criostato para possibilitar ampliar a faixa de temperatura das medidas de CER, a fim de

dispor-mos de uma técnica que permita suprir a ausência de sinal, pela técnica de PR, em determinadas faixas de temperatura.

2) Calcular as funções de onda eletrônica para os estado de buraco leve (lh_{1S}) e estados excitados (anti-simétricos hh_{1A} , lh_{1A}) para subsidiar a análise da interação eletro - fônon.

3) Estudar as interações eletro-fônon através dos parâmetros dos ajustes das curvas da energia de transição excitônica em função da temperatura pelos modelos de Vinã e Pässler.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] C. Angulo, A. Munhoz e J. Pareja, *Teoria e Prática de Eletrônica*. Makron Books , São Paulo (1993).
- [2] Sociedade Brasileira de Física, *Pensando o Futuro: O desenvolvimento da física e sua inserção na vida social e econômica do país*. Editora Livraria da Física (2005).
- [3] M. A. Herman, and H. Sitter, *Molecular Beam Epitaxy*. Springer-Verlag, Berlin (1989).
- [4] V. Mitin, V. Kochelap, and M. A. Stroschio, *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics*. Cambridge University Press (1999).
- [5] D. Bimberg, *J. Phys. D* **38**, 2055 (2005).
- [6] B. R. Bennett, J. B. Boss, M. G. Ancona, N. A. Papnicolaou, G. A. Cooke, and H. Kheyrandish, *J. Elec. Mater.* **36**, 99 (2007).
- [7] S. J. Chang, W. C. Lai, Y. K. Su, J. F. Chen, C. H. Liu, and U. H. Liaw, *IEEE Selec. Top. Quant. Elec.* **8**, 278 (2002).
- [8] R. Akimoto, K. Akita, B. S. Li, and T. Hasama, *IEEE Quantum Electronics and Laser Science Conference*, 1 (2006).
- [9] Q. Wang, S. Junique, D. Agren, B. Noharet, H. Malm, J. Borglind, J. Y. Andersson, L. Sjoqvist, and J. Ohgren, *Proc. SPIE* **4947**, 59 (2003).
- [10] X. G. Peralta, S. J. Allen, M. C. Wanke, N. E. Harff, J. A. Simmons, M. P. Lilly, J. L. Reno, P. J. Burke, and J. P. Eisenstein, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1627 (2002).
- [11] X. G. P. Grish, *Terahertz plasmon modes in grating coupled double quantum well field effect transistors*. Ph.D. thesis, University of California, Santa Barbara (2002).
- [12] P. Jänes, P. Holmström, and U. Ekenberg, *IEEE J. Quantum Elec.* **38**, 178 (2002).
- [13] H. Yoshida, T. Simoyama, V. A. Gopal, J. Kasai, T. Mozume, and H. Ishikawa, *IEICE Transactions on Electronics* **E87C** (7), 1134 (2004).
- [14] M. Miura, and S. Katayama, *Sci. Tech. Adv. Mater.*, 286 (2006).
- [15] S. Ristic, and N. A. F. Jaeger, *IEEE Photonics Technology Letters* **18**, 316 (2006).
- [16] XU Wei-Huai, WU Jin-Hui, and GAO Jin-Yue, *Chin. Phys. Lett.* **22**, 599 (2005).
- [17] T. Sahu, *J. Appl. Phys.* **96**, 5576 (2004).
- [18] T. W. Kim, and D. U. Lee, *Appl. Surf. Sci.* **153**, 96 (2000).

- [19] J. Singh, *Physics of semiconductors and their heterostructures*. Edited by A. T. Brown. McGraw Hill (1993).
- [20] Y. P. Varshni, *Physica (Utrecht)* **34**, 194 (1967).
- [21] R. Pässler, *Phys. Rev. B* **66**, 085201 (2002).
- [22] L. Viña, S. Logthetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **30**, 1979 (1984).
- [23] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. (b)* **193**, 135 (1996).
- [24] P. B. Allen, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **23**, 1495 (1981).
- [25] A. Manoogian, and J. C. Wolley, *Can. J. Phys.* **62**, 285 (1984).
- [26] P. B. Allen, and V. Heine, *J. Phys. C: Solid State* **9**, 2305 (1976).
- [27] S. Zollner, S. Gopalan, and M. Cardona, *Solid State Commun.* **77**, 485 (1991).
- [28] J. P. Walter, R. R. L. Zucca, M. L. Cohen, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 102 (1970).
- [29] S. A. Lourenço, *Efeito da composição da liga e das interfaces sobre a variação térmica da energia das transições excitônicas em poços quânticos de materiais III-V*. 2004. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Londrina, Londrina.
- [30] L. Pavesi, and M. Guzzi, *J. Appl. Phys.* **75**, 4779 (1994).
- [31] D. F. CÉSAR *Estudo das Propriedades ópticas do poço quântico duplo de AlGaAs/GaAs por fotoluminescência*. 2005. (TCC) – Departamento de Física -Universidade Estadual de Londrina, Londrina.
- [32] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [33] Q. X. Zhao, B. Monemar, P. O. Holtz, M. Willander, B. O. Fimland, and K. Johannessen, *Phys. Rev. B* **50**, 4476 (1994).
- [34] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 5683 (1982).
- [35] J. S. Blakemore, *J. Appl. Phys.* **53**, R123 (1982).
- [36] D. S. Chuu, and Y. C. Lou, *Phys. Rev. B* **43**, 14504 (1991).
- [37] L. C. Andreani, and A. Pasquarello, *Phys. Rev. B* **42**, 8928 (1990).
- [38] C. Weisbuch, *Applications of Multiquantum Wells, Selective Doping and Superlattices, in Semiconductors and Semimetals*. Edited by R. K. Willardson, and A. C. Beer. Academic Press (1987).
- [39] H. Mathieu, P. Lefebvre, and P. Christol, *Phys. Rev. B* **46**, 4092 (1992).

- [40] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Physics*. Les Ulis Cedex (1988).
- [41] T. Westgaard, Q. X. Zhao, B. O. Fimland, K. Johannessen, and L. Johnsen, *Phys. Rev. B* **45**, 1784 (1992).
- [42] E. M. Lopes, D. F. César, J. L. Duarte, L. C. Poças, I. F. L. Dias, and E. Laureto, *Rev. Bras. Ens. Fís.* (to be published).
- [43] L. L. Schiff, *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill (1968).
- [44] D. F. César, *Cálculo e determinação experimental da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos de AlGaAs/GaAs*. 2008. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Londrina, Londrina.
- [45] X. F. He, *Phys. Rev. B* **43**, 2063 (1991).
- [46] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar. M. Chandrasekhar, and Y. M. Kappor, *Phys. Rev. B* **37**, 1035 (1988).
- [47] S. Selei, A. Cricenti. M. Righini. C. Petrillo. F. Sacchetti. F. Alexandre, and G. Chiarotti, *Appl. Surf. Science* **55**, 637 (1992).
- [48] H. Fesefeldt, *Z. Phys.* **64**, 623 (1930).
- [49] T. Muto, and S. Oyama, *Prog. Theor. Phys.* **5**, 333 (1950).
- [50] M. Cardona, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 196403-1 (2004).
- [51] P. Debye, *Ann. Phys.* **22**, 180 (1907).
- [52] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. B* **216**, 975 (1999).
- [53] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, L. C. Poças, D. O. Toginho Filho, and J. R. Leite, *Bras. J. Phys.* **34**, 517 (2004).
- [54] R. Pässler, *Phys. Stat. Sol. (b)* **200**, 155 (1997).
- [55] S. Logothetidis, M. Cardona, and M. Garriga, *Phys. Rev. B* **43**, 11950 (1991).
- [56] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **83**, 3356 (1998).
- [57] 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, and J. C. Harmand, *J. Appl. Phys.* **97**, 103518-1 (2005).
- [58] 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).
- [59] R. Pässler, and G. Oelgart, *J. Appl. Phys.* **82**, 2611 (1997).

- [60] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, J. L. Duarte, E. Laureto, E. A. Meneses, J. R. Leite, and I. Mazzaro, *J. Appl. Phys.* **89**, 6159 (2001).
- [61] E. L. Mantovani, *Estudo das Propriedades Ópticas da Super-Rede InGaAs/InGaAlAs:Si Através da Técnica de Fotoluminescência*. 2005. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina.
- [62] D. O. Toginho Filho, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, S. A. Lourenço, L. C. Poças, S. S. Prabhu, and J. Klem, *J. Appl. Phys.* **97**, 123702 (2005).
- [63] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona, *Phys. Rev.* **B**, **35**, 9174 (1987).
- [64] P. Lautenschlager, M. Garriga, and M. Cardona, *Phys. Rev.* **B**, **36**, 4813 (1987).
- [65] R. Pässler, *Solid State Electronics* **39**, 1311 (1996).
- [66] S. Gopalan, P. Lautenschlager, and M. Cardona, *Phys. Rev.* **B** **35**, 5577 (1987).
- [67] R. Pässler, *J. Appl. Phys.* **88**, 2570 (2000).
- [68] D. E. Aspnes. *Handbook on Semiconductors*. Edited by T. S. Moss. Amsterdam. North Holland, 1980, chap. 4A.
- [69] L. V. Hove. *Phys. Ver.* **89**, 1189 (1953).
- [70] D. E. Aspnes. *Surface Science* **37**, 418 (1973).
- [71] D. E. Aspnes, J. E. Rowe. *Phys. Rev Lett.* **27**, 188 (1971).
- [72] D. E. Aspnes. *Handbook on Semiconductors*. Edited by T. S. Moss. Amsterdam. North-Holland, 1980, chap. 4A.
- [73] M. Abramowitz. *Handbook of Mathematical Functions*. New York. Dover Public, 1972.
- [74] D. E. Aspnes, A. A. Studna. *Phys. Rev. B* **7**, 4605 (1973).
- [75] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [76] F. H. Pollak, H. Shen. *Mat. Sci. And Engineering R10 (7-8)*, 275 (1993).
- [77] B. V. Shanabrook, O. J. Glembocki, W. T. Beard. *Phys. Rev. B* **35**, 2540 (1987).
- [78] D. E. Aspnes, A. Frova. *Phys. Ver. B* **2**, 1037 (1970).
- [79] Laureto, E.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Iwamoto, H.; Lourenço, S. A.; Di Mauro, E.; Freitas, M. T. P.; Toginho Filho, D. O., *Caracterização de Materiais Semicondutores pela Técnica de Fotorefletância*. Londrina, 1998. NT 003/98, Nota Técnica do Grupo de Óptica e Optoeletrônica, Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, Londrina.

- [80] S. Monéger, Y. Baltagi, T. Benyattou, A. Tabata, B. Ragot, G. Guillot, A. Georgakilas, K. Zekentes, G. Halkias. Photoreflectance studies of lattice-matched and strained InGaAs/InAlAs single quantum wells. *J. Appl. Phys.* **74** (2), 1437 (1993).
- [81] E. L. Mantovani, *Estudo das Propriedades Ópticas de Poços Quânticos Simples e Poços Quânticos Duplos Acoplados através da Técnica de Fotoluminescência*. 2009. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Londrina, Londrina.
- [82] X. T. Zhu, H. Goronkin, G. N. Maracas, R. Droopad, and M. A. Stroscio, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2141 (1992).
- [83] J. Pozela, K. Pozela, and V. Juciene, *Semiconductors* **34**, 1011 (2000).
- [84] I. S. Vasil'evskii, G. B. Galiev, G. V. Ganin, R. M. Imamov, E. A. Klimov, A. A. Lomov, V. G. Mokerov, V. V. Saraikin, M. A. Chuev, *Russian Microelec.* **34**, 78 (2005).
- [85] X. F. Wang, I. C. da Cunha Lima, A. Troper, and X. L. Lei, *J. Appl. Phys.* **85**, 6598 (1999).
- [86] J. Pozela, V. Juciene, A. Namajūnas, and K. Pozela, *Fizika i Tehnika Poluprovodnikov* **31**, 85 (1997).
- [87] J. Pozela, V. Juciene, and K. Pozela, *IEEE 0-8186-7321-4*, 90 (1996).
- [88] J. Pozela, V. Juciene, A. Namajūnas, and K. Pozela, *J. Appl. Phys.* **81**, 1775 (1997).
- [89] V. F. Sapega, M. P. Chamberlain, T. Ruf, M. Cardona, D. N. Mirlin, K. Töttemeyer, A. Fischer, and K. Eberl, *Phys. Rev.* **B 52**, 14144 (1995).
- [90] K. W. Sun, H. Y. Chang, C. M. Wang, S. Y. Wang, and C. P. Lee, *Nanotechnology* **11**, 227 (2000).
- [91] R. Y. Tanaka, A. Passaro, N. M. Abe, J. M. Villas-Bôas, G. S. Vieira, and S. Stephany, *SBMO/IEEE MTT-S Inter. Micro. Optoel. Conf.*, 914 (2007).
- [92] C. R. McIntyre, and T. L. Reinecke, *Phys. Rev.* **B. 56**, 13428 (1997).