



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

DANIEL FERREIRA CESAR

**CÁLCULO E DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA
ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS
QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS DE *AlGaAs/GaAs***

Londrina
2008

DANIEL FERREIRA CESAR

**CÁLCULO E DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA
ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS
QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS DE *AlGaAs/GaAs***

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

Orientador: Prof. Dr. José Leonil Duarte

Londrina
2008

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

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)

C421c César, Daniel Ferreira.

Cálculo e determinação experimental da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos de *AlGaAs/GaAs* / Daniel Ferreira César. – Londrina, 2008.
111f. : il.

Orientador: José Leonil Duarte.

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

1. Semicondutores – Propriedades óticas – Teses. 2. Fotoluminescência – Teses. 3. Poços quânticos – Teses. 4. Sistemas de baixa dimensionalidade – Teses. 5. Teoria de éxcitons – Teses. I. Duarte, José Leonil. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU 529.2

DANIEL FERREIRA CESAR

**CÁLCULO E DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA
ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS
QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS DE *AlGaAs/GaAs***

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

BANCA EXAMINADORA

Prof. Orientador Dr. José Leonil Duarte
Universidade Estadual de Londrina

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

Prof. Dr. Paulo Sergio Soares Guimarães
Universidade Federal de Minas Gerais

Londrina, 22 de fevereiro de 2008.

DEDICATÓRIA

A minha querida esposa Juliana pelo carinho, apoio e compreensão nos momentos difíceis ("fofinha" te amo muito). Aos meus pais por me mostrarem sempre o caminho correto a percorrer.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. José Leonil Duarte pela valiosa orientação ao longo dos cinco anos em que trabalhamos juntos.

Ao Prof. Dr. Edson Laureto pelas discussões e auxílio no laboratório ao longo dos cinco anos em que estive no grupo.

Aos Prof. Dr. Ivan Frederico Lupiano Dias pelas críticas sempre construtivas que, sem dúvida, me ajudaram a crescer muito.

Ao Ms. Élder Mantovani Lopes pelas discussões sobre o trabalho e pelas medidas de magnetofotoluminescência na Universidade Federal de Minas Gerais.

Ao Dr. Dari Toginho pelas "aulas" de eletrônica.

Aos amigos da turma de mestrado 2006-2008, Adalberto, Ademar, Cristiane, Márcio, João Lucas, Leonardo, Paulo, Rafael, Ricardo M., Ricardo G. pelo prazer da convivência e "boas conversas".

Aos colegas de laboratório, Rômulo, Marco Aurélio, Élder, Luiz e Sidney pelas "boas conversas e discussões.

A Paulo José, Márcio Daldin, Ademar e João Lucas, amigos para toda vida.

A CAPES pelo apoio financeiro.

"Hett wasmade in heaven."

(Marcus Çrosskppf)

CESAR, Daniel Ferreira. **Cálculo e determinação experimental da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos de $AlGaAs/GaAs$** . 2008. 136f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2008.

RESUMO

Este trabalho objetiva o cálculo e a determinação experimental da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos. Foram estudadas duas amostras, as quais possuem, no total, um poço quântico simples e três poços quânticos duplos de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$ com diferentes espessuras de barreira central. Nos poços duplos, o material da barreira central é constituído do mesmo material das barreiras laterais. Para todas as estruturas foram determinados, teoricamente, os níveis de energia para elétrons e buracos, a energia de ligação excitônica para o estado $1S$, a dimensionalidade do sistema e as energias das transições óticas permitidas pela regra de seleção. O cálculo da energia de ligação excitônica e da dimensionalidade foi realizado utilizando o modelo de cálculo proposto por Mathieu et al. [1], dentro do formalismo do espaço dimensional fracionário. Para a determinação experimental da energia da transição ótica e da energia de ligação excitônica, foram feitas medidas de fotoluminescência e magneto-fotoluminescência a baixas temperaturas. Os espectros de fotoluminescência obtidos a 10 K permitiram a obtenção do valor experimental das energias de transição das estruturas. Já os espectros de magneto-fotoluminescência obtidos a 4 K, com campo magnético variando entre 0 T e 12 T, foram utilizados na obtenção das curvas de deslocamento diamagnético em função do campo magnético aplicado. Ajustando estas curvas com modelos adequados para campos de alta e baixa intensidade foi possível a determinação experimental da dimensionalidade, da massa reduzida efetiva e da energia de ligação excitônica do estado $1S$ para todos os poços. Os cálculos teóricos da energia de ligação excitônica, da dimensionalidade e da energia de transição apresentam concordância muito boa com os resultados experimentais e, de forma geral, mostram que quanto mais espessa é a barreira central nos poços duplos, maior é o confinamento dos portadores, gerando um aumento na energia de ligação excitônica e uma diminuição da dimensionalidade do sistema. Assim, constata-se que o método MLC de cálculo de energia de ligação de éxcitons pode ser aplicado a poços quânticos simples e duplos, o que simplifica consideravelmente a determinação deste parâmetro.

Palavras-chave: Semicondutores - propriedades óticas. Fotoluminescência. Poços quânticos. Sistemas de baixa dimensionalidade. Teoria dos éxcitons.

CESAR, Daniel Ferreira. **Cálculo e determinação experimental da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos de $AlGaAs/GaAs$** . 2008. 136f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2008.

ABSTRACT

This work aims the calculation and the experimental determination of the excitonic binding energy in simple and double quantum wells. Two samples, which have in total one single quantum well and three $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ double quantum wells, were investigated. In the double quantum wells, the central barrier material is constituted of the same material as the lateral barriers. It was theoretically determined for all structures the energy levels for electrons and holes, the $1S$, excitonic binding energy, the system dimensionality and the energies of the optical transitions allowed by the selection rule. The calculation of the excitonic binding energy and of the dimensionality was accomplished using the MLC calculation model, in the fractional dimension approach. For the experimental determination of the optical transition energy and of the excitonic binding energy, photoluminescence and magnetophotoluminescence measurements were carried out at low temperatures. The photoluminescence spectra obtained at 10 K allowed the experimental determination of the value for the transition energy values for all the structures. The magnetophotoluminescence spectra obtained at 4 K, with magnetic field ranging between 0 T and 12 T, were used to obtain the diamagnetic shift curves as a function of the applied magnetic field. Through the fitting of these curves with appropriated models for high and low field intensities, it was possible to determine experimentally the dimensionality, the effective mass and the $1S$ excitonic binding energy. The theoretical calculations for the excitonic binding energy, for the dimensionality and for the transition energy present a very good agreement with the experimental results and, in a general way, they show that with an increase in the central barrier thickness of the double wells there is an increase in the confinement degree of the carriers, what increases the excitonic binding energy and reduces the system dimensionality. Therefore, it is verified that the MLC method for calculating the exciton binding energies can be applied to single and double quantum wells, what simplifies considerably the determination of this parameter.

Keywords: Semiconductors - optical properties. Photoluminescence. Quantum wells. Exciton theory.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Comparação entre o tamanho dos éxcitons de Wannier-Mott e Frenkel.....	21
Figura 2.2 – Comparação esquemática entre o tamanho do éxciton de Wannier-Mott e um átomo de hidrogênio.....	22
Figura 2.3 – Estrutura de bandas de um semiconductor em $T = 0K$. Os elétrons ocupam todos os estados na banda de valência (BV). A próxima banda disponível, a banda de condução (BC), possui estados completamente vazios e entre as duas bandas há uma energia de “gap” (E_g).....	23
Figura 2.4 – (a) Interação de fótons, com energia $\hbar\omega > E_g$, com elétrons da BV (b) Excitação de um elétron da BV para a BC, deixando um buraco na BV	23
Figura 2.5 – (a) Relaxação dos portadores para o nível de mais baixa energia em suas respectivas bandas. (b) Formação do éxciton	25
Figura 2.6 – Recombinação excitônica. O excesso de energia é emitido na forma de radiação eletromagnética, com energia $\hbar\omega = E_g - E_{exc}$	25
Figura 3.1 – Comportamento do raio a_{1s} (a) e da energia de ligação E_{1s} (b) para o éxciton no estado fundamental(1s) em função da dimensionalidade α do sistema.....	34
Figura 5.1 – A estrutura física e o perfil de potencial do poço quântico simples, que tem a forma de um poço retangular ao longo da direção de crescimento, z , da heteroestrutura	56
Figura 5.2 – Esquema do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento. 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	58
Figura 5.3 – Esquema da regra de seleção para as transições no poço quântico simples. Só poderão ocorrer transições entre estados com o mesmo número quântico p	59

- Figura 5.4** – Penetração da função de onda dos portadores na região das barreiras de potencial. A $\phi(z)$ é a função de onda para o estado $|p = 1 \rangle$, seja este estado de elétron ou buraco. A parte hachurada denota a penetração da função de onda nas barreiras de potencial 60
- Figura 5.5** – Perfil de potencial ao longo da direção z do poço quântico. O potencial assume os seguintes valores: zero no fundo do poço e $\Delta E_{c(v)}$ nas barreiras; os índices c e v indicam, respectivamente, que o “offset” é em relação a banda de condução e valência. E_1 e E_2 são as energias assumidas pelos portadores no poço quântico, que possui uma largura L_w e tem suas interfaces definidas por $\pm L_w/2$ 60
- Figura 5.6** – Função de onda associada aos estados: (a) $|p=1\rangle$ e (b) $|p=2\rangle$ 62
- Figura 5.7** – Estrutura física e o perfil de potencial de um poço quântico duplo de *AlGaAs/GaAs*, com barreira central de *AlGaAs*. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços e L_b é a largura da barreira de separação entre os poços (barreira central) 63
- Figura 5.8** – Comportamento das funções de onda do poço quântico duplo a medida que $L_b \rightarrow \infty$. Como a barreira de separação, L_b é muito espessa, as funções de onda não sofrem “overlap”, ou seja, um poço não perturba o outro. Desse modo, o sistema pode ser tratado como dois poços quânticos simples independentes 64
- Figura 5.9** – (a) Largura da barreira central, L_b , suficientemente estreita para que haja interação das funções de onda dos poço quântico individuais; devido ao efeito de tunelamento as funções de onda sofrem um “overlap”. (b) Devido a este “overlap” o nível de energia $|p = 1 \rangle$ sofre um “splitting”, gerando um nível simétrico, $|p = 1s \rangle$, de menor energia, e um nível anti-simétrico, $|p=1A\rangle$, de maior energia 65
- Figura 5.10** – Situação em que $L_b = 0$ e o poço quântico duplo evolui para um sistema de poço quântico simples de largura $2L_w$. Os níveis simétricos e anti-simétricos evoluem, respectivamente, para o primeiro e segundo níveis do poço de largura $2L_w$ 66

Figura 5.11 – Estrutura de bandas de energia do poço quântico duplo. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços, L_b é a largura da barreira de separação, ΔE_c e ΔE_v são, respectivamente, os “offsets” da BC e da BV, e_{1S} e e_{1A} são, respectivamente, os níveis simétricos e anti-simétricos de elétrons, hh_{1S} e hh_{1A} são, respectivamente, os níveis simétricos e anti-simétricos de buraco pesado.....	66
Figura 5.12 – Estrutura energética do poço quântico duplo ao longo da direção de crescimento, z	67
Figura 6.1 – Perfil de potencial de um PQS ao longo da direção de crescimento, z	75
Figura 6.2 – Esquema da largura efetiva L_w^* em um poço quântico simples	79
Figura 6.3 – Esquema dos efeitos da não parabolicidade da banda em poço quânticos simples. Esses efeitos são: (A) o deslocamento dos níveis de energia, com relação ao mesmo em uma banda perfeitamente parabólica, (B) a região de mínimo da curvatura de dispersão que corresponde à massa paralela (massa no plano perpendicular à direção de z) é diferente da massa paralela dos portadores em materiais volumétricos (“bulk”), (C) A dispersão das sub-bandas (curva tracejada) sofre um desvio da curva parabólica (curva pontilhada)	82
Figura 6.4 – Perfil de potencial de um PQDS ao longo da direção de crescimento, z	87
Figura 7.1 – Esquema de crescimento das amostras. (a) Amostra 2606. (b) Amostra 2607.....	91
Figura 7.2 – Formação e recombinação do par elétron-buraco.....	94
Figura 7.3 – Sistema experimental da fotoluminescência.....	96
Figura 7.4 – Sistema experimental da magnetofotoluminescência.....	98
Figura 7.5 – Esquema de um experimento magneto-óptico feito na configuração de Faraday.....	99
Figura 8.1 – Variação dos níveis de energia dos níveis e_1 e e_2 e e_3 de elétrons com a largura do PQS de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$	106
Figura 8.2 – Variação dos níveis de energia e_1 e e_2 e e_3 de elétrons com a altura do PQS de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Note que o nível e_3 (apenas um ponto) só aparece para $x \approx 40\%$ de Al	107

Figura 8.3 – Variação dos níveis de energia (e_s, e_A, hh_s e hh_A) com a largura da barreira de separação para um PQDS de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$. A largura dos poços é 40\AA	108
Figura 8.4 – Representação de L_w em sistemas de PQS e PQD	109
Figura 8.5 – Comportamento da energia de ligação em função da largura dos poços quânticos simples e duplo de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$	110
Figura 8.6 – Comportamento da dimensionalidade em função da largura do poço quântico simples e duplo de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$	111
Figura 8.7 – Comportamento da energia de ligação e da dimensionalidade em função da largura da barreira de separação entre os poços simples. Os poços possuem 40\AA de largura cada	112
Figura 9.1 – Espectro de PL da amostra 2606 obtido a 11 K e com potencia de excitação de 2 mW	115
Figura 9.2 – Espectro de PL da amostra 2607 obtido a 10 K e com potencia de excitação de 2 mW	115
Figura 9.3 – Espectro de MPL obtido à temperatura de 4 K da amostra 2606.....	116
Figura 9.4 – Espectro de MPL obtido à temperatura de 4 K da amostra 2607.....	117
Figura 9.5 – Curva do deslocamento diamagnético para o PQS com espessura de 80\AA (a) e para o PQDS com barreira central de 15\AA (b).....	118
Figura 9.6 – Curva do deslocamento diamagnético para o PQDS com barreira central de 5\AA (a) e 30\AA (b)	118
Figura 9.7 – Ajuste das expressões do deslocamento diamagnético aos pontos experimentais, para o PQS de 80\AA e para o PQD com barreira central de 5\AA de espessura (2606)	121
Figura 9.8 – Ajuste das expressões do deslocamento diamagnético aos pontos experimentais, para os PQDSs com barreira central de 5\AA e 30\AA de espessura (2607).....	121
Figura 9.9 – Comparação entre as curvas do deslocamento diamagnético em função do campo magnético aplicado para as amostras de PQS e PQDs	123

LISTA DE TABELAS

Tabela 7.1 – Parâmetro dos materiais $GaAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$	92
Tabela 8.1 – Níveis de energia calculados para os PQS's de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com espessuras de 80Å e 40Å.....	101
Tabela 8.2 – Níveis de energia calculados para os PQDs com barreira central de de 5Å, 15Å e 30Å	102
Tabela 8.3 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) pra o PQS de 80Å de espessura e para o poço de 40Å de espessura.....	103
Tabela 8.4 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para os PQDs 5Å, 15Å e 30Å.....	105
Tabela 8.5 – Energia de transição teórica, (E_T), para os PQS's e PQD's.....	113
Tabela 9.1 – Identificação dos picos dos espectros de PL (Figs. 9.1 e 9.2) a baixa temperatura.....	122
Tabela 9.2 – Valores Experimentais da energia de ligação excitônica, E_b , da dimensionalidade, a , e da massa reduzida efetiva, μ^*	125
Tabela 9.3 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da dimensionalidade e da massa efetiva reduzida	125
Tabela 9.4 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de ligação excitônica.....	127
Tabela 9.5 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de emissão óptica das amostras estudadas	128

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	16
2 EXCITONS	20
2.1 INTRODUÇÃO	20
2.2 EXCITONS DE FRENKEL.....	20
2.3 EXCITONS DE WANNIER-MOTT.....	21
2.4 FORMAÇÃO E RECOMBINAÇÃO DE EXCITONS EM SEMICONDUTORES BULK.....	23
2.5 EXCITONS EM MATERIAIS BULK.....	25
3 EXCITONS EM SÓLIDOS ANISOTRÔPICOS	31
3.1 INTRODUÇÃO	31
3.2 O MODELO DO ESPAÇO DIMENSIONAL FRACIONÁRIO	32
3.3 ESTADOS LIGADOS DE ENERGIA	33
3.3.1 Comportamento do Raio Orbital e da Energia em Função da Dimensionalidade do Sistema.....	34
4 EXCITONS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS	36
4.1 INTRODUÇÃO	36
4.2 PARTÍCULA CARREGADA EM UM CAMPO MAGNÉTICO - FORMALISMO CLÁSSICO	36
4.2.1 Formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano	36
4.2.2 Lagrangeana e Hamiltoniana Eletromagnética.....	38
4.3 PARTÍCULA CARREGADA EM UM CAMPO MAGNÉTICO - FORMALISMO QUÂNTICO	41
4.4 EXCITONS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS.....	47
4.4.1 Excitons em Campos de Baixa Intensidade.....	48
4.4.2 Excitons em Campos Magnéticos de Alta Intensidade	49
4.5 DESLOCAMENTO DIAMAGNÉTICO NO FORMALISMO DO ESPAÇO DIMENSIONAL FRACIONÁRIO	51
5 POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS	55
5.1 POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES.....	55
5.1.1 Níveis de Energia do Poço Quântico Simples	59
5.2 POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS	62

5.2.1 Níveis de Energia do Poço Quântico Duplo.....	67
5.3 ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS	69
5.3.1 Dimensionalidade em Poços Quântico Simples	71
5.3.2 Dimensionalidade em Poços Quânticos Duplos.....	72
6 MÉTODO ANALÍTICO PARA O CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO DE ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS.....	74
6.1 CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES.....	74
6.2 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES PELO MÉTODO MLC	77
6.2.1 Cálculo do Vetor de Onda Característico (K_b) e da Largura Efetiva do Poço Quântico Simples (L_w^*)	78
6.2.2 Descasamento da Massa Efetiva dos Portadores entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico.....	79
6.2.3 Correção Devido ao Efeito de não Parabolicidade da BC.....	81
6.2.4 Descasamento da Constante Dielétrica entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico.....	83
6.2.5 Dependência da Massa Efetiva com a Dimensionalidade α	84
6.3 DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA (E_B)	85
6.4 CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS SIMÉTRICOS	86
6.5 EXTENSÃO DO FORMALISMO MLC PARA POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS.....	89
7 DESCRIÇÃO DAS AMOSTRAS E DAS TÉCNICAS EXPERIMENTAIS UTILIZADAS	90
7.1 AMOSTRAS.....	90
7.1.1 Parâmetros das Amostras	92
7.2 A TÉCNICA DE FOTOLUMINESEÊNIA	93
7.2.1 Princípios Físicos da Fotoluminescência.....	93
7.2.2 Sistema Experimental de Fotoluminescência.....	96
7.2.3 Fotoluminescência com Aplicação de Campo Magnético	97
8 RESULTADOS TEÓRICOS.....	100
8.1 NÍVEIS DE ENERGIA DOS POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES.....	100
8.2 NÍVEIS DE ENERGIA DOS POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS	101

8.3 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES	102
8.4 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS.....	104
8.5 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS TEÓRICOS	105
8.5.1 Influência da Largura do Poço e da Concentração de Alumínio sobre os Níveis de Energia do PQS	105
8.6 INFLUÊNCIA DA LARGURA DA BARREIRA CENTRAL SOBRE OS NÍVEIS DE ENERGIA DO POÇO QUÂNTICO DUPLO	107
8.7 COMPORTAMENTO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO E DA DIMENSIONALIDADE EM FUNÇÃO DA LARGURA DO POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS.....	109
8.8 CÁLCULO DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO DAS AMOSTRAS DE POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS	112
9 RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO	114
9.1 RESULTADOS DAS MEDIDAS DE FOTOLUMINESEÊNIA A BAIXA TEMPERATURA	114
9.2 RESULTADOS DAS MEDIDAS DE MAGNETO-FOTOLUMINESCÊNCIA.....	116
9.3 DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA	117
9.4 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	120
9.4.1 Fotolumineseênia a Baixa Temperatura	122
9.4.2 Magnetofotoluminescência.....	122
9.4.3 Comparação entre os Resultados Teóricos e Experimentais.....	125
10 CONCLUSÃO	129
REFERÊNCIAS	133

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

O rápido progresso das técnicas de crescimento de materiais nas últimas décadas tornou possível a preparação de heteroestruturas pela superposição de camadas extremamente finas de distintos materiais semicondutores. Dentre as várias técnicas existentes, a técnica de epitaxia por feixe molecular - MBE -(do inglês - "Molecular Beam Epitaxy") é uma das principais técnicas de preparação de materiais semicondutores que têm sido utilizada na obtenção de filmes monocristalinos com alto grau de pureza [2].

Dentre os diversos tipos de heteroestruturas que podem ser produzidas pela técnica de MBE, o poço quântico simples (PQS) e o poço quântico duplo (PQD) são duas heteroestruturas bastante pesquisadas a varias décadas. Um poço quântico pode ser preparado, por exemplo, intercalando-se uma camada de *GaAs* entre duas camadas de $Al_xGa_{1-x}As$. O ternário $Al_xGa_{1-x}As$ possui "gap" maior que o do *GaAs* e a estrutura criada forma uma região de eonfinamento bidimensional de portadores de cargas com níveis de energia característicos da estrutura assim formada. O eonfinamento bidimensional de portadores de carga permite o estudo de novas propriedades físicas, tais como, por exemplo, o efeito Hall Quântico [3, 4], o efeito Hall Quântico Fracionário [5, 6] e o efeito Stark de eonfinamento quântico [7], que tem diversas aplicações de interesse tecnológico.

As novas propriedades elétricas e ópticas apresentadas por poços quânticos, não observadas em materiais volumétricos ("bulk"), provocaram um grande impacto tecnológico nas áreas de eletrônica e optoeletrônica, levando industrias destes ramos a desenvolverem e produzirem novos dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos baseados nestas novas propriedades.

O poço quântico simples é empregado na fabricação de uma grande variedade de dispositivos, tais como: lasers de semicondutores [8], transistores eletrônicos de alta mobilidade [9], diodos semicondutores [10], chaves optoeletrônicas [11], moduladores de eletro-absorção [12], entre outros. Os poços quânticos duplos acoplados podem ser empregados na fabricação de fotodetectores [13, 14], chaves eletro-ópticas [14], osciladores terahertz [14], detectores terahertz sintonizáveis [15] e moduladores de eletro-absorção [16].

O estudo e a caracterização de materiais e heteroestruturas semicondutoras podem ser realizados através de técnicas de espectroscopia óptica tais como fotoluminescência (PL) [17, 18], fotoluminescência de excitação (PLE) [19],

magnetofotoluminescência (MPL) [26] e fotorefletância (PR) [20, 21], entre outras. Estas técnicas destacam-se pelas ricas informações proporcionadas (energia de "gap", defeitos na interface, níveis de impureza, campo elétrico interno, etc.) e por serem técnicas de caráter não destrutivo [22], ou seja, dispensam preparação especial da amostra e não inutilizam a amostra após as medidas. Existe o inconveniente, entretanto, de algumas destas técnicas, como por exemplo a PL, só fornecerem bons resultados a baixas temperaturas (faixa de 0 a 77K), sendo pouco eficiente em faixas de temperaturas superiores. Assim, o estudo das propriedades físicas de materiais e heteroestruturas semicondutoras em função da temperatura é importante por permitir associar resultados obtidos por técnicas otimizadas a baixas temperaturas com a região de funcionamento dos dispositivos.

A baixas temperaturas os espectros de PL e MPL são dominados por transições excitônicas, de modo que um amplo entendimento do comportamento dos éxcitons em sistemas como os de poços quânticos simples e duplos torna-se de suma importância para o entendimento das propriedades ópticas apresentadas por estes sistemas. Os éxcitons geralmente são formados a partir da absorção de luz do material, e constituem um estado excitado do material. Eles (os éxcitons) surgem da interação de Coulomb entre um elétron, localizado na banda de condução (BC), e um buraco, localizado na banda de valência (BV), e possuem estrutura similar a de átomos monoelétrônicos, ou seja, o elétron e o buraco girando ao redor do centro de massa do sistema e interagindo por meio de um potencial central (o de Coulomb). Para se estudar a dinâmica excitônica em materiais semicondutores utiliza-se como base o modelo que descreve o átomo de hidrogênio, fazendo-se algumas modificações no Hamiltoniano do sistema, visto que o éxciton se encontra em um meio com constante dielétrica ϵ , e não no vácuo como o átomo de hidrogênio; além do que há uma energia de "gap" entre o elétron e o buraco. Embora os éxcitons não transportem carga elétrica pelo material eles transportam energia, pois se deslocam por toda a rede cristalina.

Em materiais volumétricos, o modelo do átomo de hidrogênio fornece uma boa descrição da dinâmica excitônica na rede cristalina, pois estes materiais são isotrópicos. No entanto, em materiais como poços quânticos simples e duplos, o confinamento criado pela geometria da heteroestrutura ao longo da direção de crescimento provoca uma quebra da anisotropia. Nesses sistemas o modelo do átomo de hidrogênio não é mais capaz de descrever com boa precisão a dinâmica excitônica na rede. Tendo isso em mente, He [30] desenvolveu um modelo, conhecido na literatura como o *modelo do espaço dimensional fracionário*, que é capaz de fornecer uma boa descrição do éxciton em sistemas de baixa dimensionalidade. Esse

modelo permite, novamente, que o problema do éxciton seja tratado como se fosse um átomo de hidrogênio, porém, em um espaço de dimensão fracionária.

Utilizando como base o modelo de He, Mathieu et al. [1] desenvolveram um modelo analítico e livre de parâmetros de ajustes, conhecido na literatura como *MLC*, que fornece a dimensionalidade efetiva e energia de ligação excitônica em sistemas de poços quânticos simples. Utilizando os trabalhos de He e Mathieu, Zhao et al. [26] estendeu o modelo de *MLC* para sistemas de poços quânticos duplos.

O estudo dos éxcitons é a chave para o entendimento de muitos fenômenos optoeletrônicos que envolvem a interação da luz com a matéria, sendo, portanto, o ponto central deste trabalho.

Neste trabalho foi realizado um estudo de duas amostras: a primeira contendo um poço quântico simples e um poço quântico duplo de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$. A segunda contendo dois poços quânticos duplos de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$. Nos poços duplos, o material da barreira central é constituído do mesmo material das barreiras laterais. As duas amostras foram crescidas pela técnica de MBE.

Foram calculados teoricamente todos os níveis de energia para elétrons e buracos nos poços quânticos simples e duplos. Também foram calculados, utilizando o modelo *MLC*, as energias de ligação excitônicas das amostras e as dimensionalidades dos poços quânticos simples e duplos. A partir desses níveis de energia e das energias de ligação excitônicas calculou-se as energias das transições óticas permitidas pela regra de seleção. Calculou-se, também, teoricamente os níveis de energia, a energia de ligação excitônica, a dimensionalidade e a energia de transição óptica para um poço quântico simples de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com espessura de 40Å, com o objetivo de se estudar o comportamento dos níveis de energia nos poços quânticos duplos com a introdução da barreira central.

As amostras foram submetidas a medidas de fotoluminescência e fotoluminescência com aplicação de campo magnético (magneto-fotoluminescência). Os espectros de fotoluminescência a baixa temperatura foram utilizados no estudo da energia de transição óptica das amostras, enquanto que os espectros de magneto-fotoluminescência foram utilizados na construção das curvas de *deslocamento diamagnético* em função do campo magnético aplicado para as duas amostras. Essas curvas são úteis na determinação experimental da dimensionalidade dos sistemas de poços quânticos simples e duplos e na determinação experimental da energia de ligação excitônica nessas heteroestruturas.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no capítulo 2 é feita uma discussão geral sobre os éxcitons e suas propriedades em materiais volumétricos. São discutidos conceitos como o processo de formação do éxciton, energia de ligação e o raio da interação entre o par elétron-buraco. No capítulo 3 é feita uma discussão geral sobre éxcitons em sólidos anisotrópicos, e sobre o modelo do *espaço dimensional fracionário*, desenvolvido por He [30], para o estudo de éxcitons nesses materiais. No capítulo 4 é feita uma discussão geral sobre a interação do éxciton com o campo magnético. Serão discutidos os principais efeitos que ocorrem no material devido a aplicação do campo magnético como, por exemplo, o deslocamento diamagnético provocado pelo campo e a variação da energia de ligação excitônica com campo magnético. No capítulo 5 é realizada uma discussão sobre os efeitos do confinamento em PQSs e PQDs, tais como a formação dos níveis de energia dos portadores, regras de seleção para as transições ópticas, efeitos sobre os éxcitons e dimensionalidade destes sistemas. No capítulo 6 é feita uma discussão sobre o método de cálculo *MLC*, utilizado na determinação teórica da dimensionalidade e da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos. No capítulo 7 é apresentado o esquema de crescimento das amostras utilizadas nesse trabalho, bem como das técnicas de caracterização óptica utilizadas para estudá-las: a fotoluminescência e a magnetofo-toluminescência. No capítulo 8 são apresentados e discutidos os resultados dos cálculos teóricos, tais como os resultados do cálculo dos níveis de energia nos poços quânticos, a dependência destes níveis com a largura do poço (para o poço quântico simples) e da barreira central (para o poço quântico duplo). Utilizando o modelo *MLC*, foram calculados a dimensionalidade dos sistemas de poços quânticos simples e duplos e a energia de ligação excitônica nesses poços e, por último, são apresentados os cálculos da energia de transição óptica das amostras. No capítulo 9 são apresentados e discutidos os resultados experimentais, tais como os espectros de fotoluminescência (PL) a baixa temperatura e os espectros de magneto-fotoluminescência (MPL) das duas amostras. A partir destes espectros são obtidas as curvas de deslocamento diamagnético em função do campo magnético, de onde se obtém, através do ajuste das expressões adequadas, a dimensionalidade α , a massa reduzida efetiva μ^* e a energia de ligação excitônica E_b . Finalmente são comparados, nesse capítulo, os resultados experimentais e teóricos, tais como a massa reduzida efetiva μ^* , a dimensionalidade α , a energia de ligação excitônica E_b e a energia de emissão óptica. No capítulo 10 são apresentadas as conclusões gerais do trabalho.

CAPÍTULO 2 – ÉXCITONS

2.1 INTRODUÇÃO

As propriedades elétricas e ópticas dos materiais semicondutores são geralmente descritas em termos de elétrons e buracos. O conceito de buraco é usado para representar a ausência de um elétron nestes materiais, sendo conveniente pensar nestes (os buracos) como se fossem partículas de carga positiva na banda de valência. Assim como elétrons, os buracos também são dotados de massa efetiva e spin, e podem se movimentar pelo semicondutor da mesma forma que os elétrons. Pelos fato dos buracos serem positivamente carregados, o par elétron-buraco pode se atrair mutuamente e, via interação eoulombi-ana, formarem uma estrutura similar a um átomo de hidrogênio, isto é, com o buraco e o elétron girando ao redor do centro de massa do sistema. Para se estudar a dinâmica excitônica em semicondutores, utiliza-se como base os modelos que descrevem átomos hidrogenóides, fazendo apenas algumas modificações no Hamiltoniano do sistema, devido ao fato do éxciton se encontrar em um meio onde a constante dielétrica ϵ é maior que um (sendo $\epsilon = 1$ para o vácuo). A constante dielétrica é um parâmetro muito importante do sistema, pois definirá que tipo de éxciton se formará no material: ou o éxciton de Frenkel ou o de Wannier-Mott. Os éxcitons geralmente são formados a partir da absorção de luz (com energia superior à energia de "gap" do material) e podem transportar energia pelo material. Porém, estes não transportam nenhuma carga líquida, pois o éxciton é uma estrutura eletricamente neutra. Os éxcitons são a chave para o entendimento de muitos fenômenos ópto-eletrônicos quem envolvem a interação da luz com a matéria, sendo, portanto, o ponto central deste trabalho.

2.2 EXCITONS DE FRENKEL

O potencial de interação entre o elétron e o buraco é o potencial de Coulomb, que no sistema Gaussiano é dado por:

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad (2.1)$$

em que r é a distância de separação entre o elétron e o buraco (denominada de raio do éxciton) e ϵ é a constante dielétrica do meio. Dependendo do material, o valor de ϵ pode ser grande (da ordem de 10 para semicondutores) ou pequeno (da ordem de 2 para sólidos iônicos). Quando ϵ é pequeno, o potencial de interação de Coulomb (2.1) é pouco afetado (com relação ao vácuo, em que $\epsilon = 1$), de forma que a interação entre o elétron e o buraco é muito forte. O fato de ϵ ser pequeno resulta em uma blindagem muito fraca do potencial e, conseqüentemente, o éxciton fica localizado em uma pequena região do material, sendo que o seu raio é da ordem da distância interatômica ($\approx 5\text{\AA}$). Éxcitons com essas características são conhecidos como éxcitons de *Frenkel*.

2.3 ÉXCITONS DE WANNIER-MOTT

Um modelo para descrever éxcitons em materiais cujo valor da constante dielétrica é elevado (por exemplo, em semicondutores) foi proposto por Wannier (1936) [24] e Moll (1938) [25]. Quando a constante dielétrica do material é elevada, o potencial de interação de Coulomb (2.1) torna-se muito fraco e, conseqüentemente a blindagem do potencial é muito forte. Dessa forma o éxciton torna-se deslocalizado e o seu raio chega a ser da ordem de muitas dezenas de parâmetros de rede ($\approx 120\text{\AA}$ para o GaAs). Éxcitons com essa característica são conhecidos como éxcitons de *Wannier-Mott*.

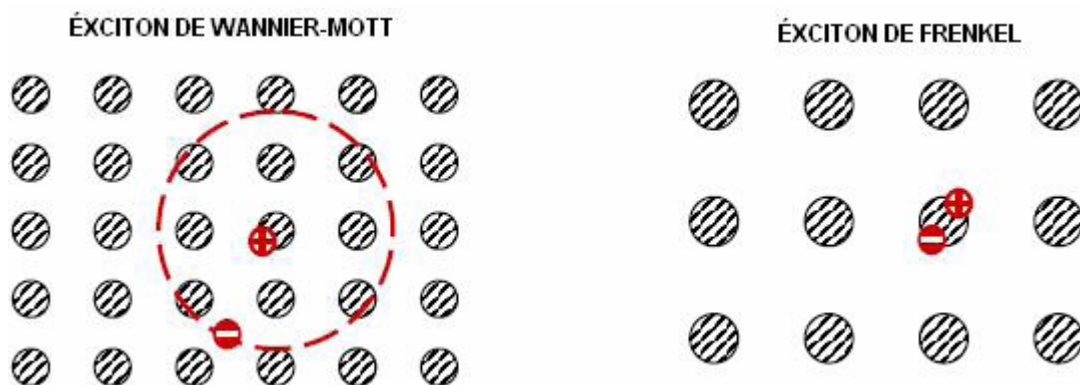


Figura 2.1 – Comparação entre o tamanho dos éxcitons de Wannier-Mott e Frenkel.

Os materiais de interesse para este trabalho são os semicondutores $GaAs$ ($\epsilon = 12.5$) e $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ ($\epsilon = 11.8$) [26] (da família dos semicondutores III-V), que possuem constante dielétrica alta. Portanto, o modelo de éxciton relevante para este trabalho será o modelo de Wannier-Mott. A Figura 2.1 mostra uma comparação entre o éxciton de Wannier-Mott e o éxciton de Frenkel em uma rede cristalina; já a Fig. 2.2 mostra uma comparação entre este mesmo éxciton e um átomo de hidrogênio.

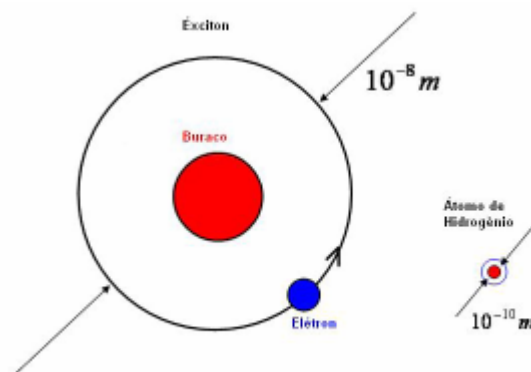


Figura 2.2 – Comparação esquemática entre o tamanho do éxciton de Wannier-Mott e um átomo de hidrogênio.

Além das características descritas acima, os éxcitons ainda podem ser divididos em livres e ligados. Os éxcitons livres são aqueles que foram vistos até o momento, isto é, um elétron e um buraco interagindo via potencial de Coulomb, sendo que o elétron e o buraco movem-se ao redor do centro de massa do sistema, formando uma estrutura similar à átomos monoelétrônicos e que se movem pela rede cristalina e, podem até interagir com outras estruturas como, por exemplo, impurezas, entretanto, eles não se ligam com estas. Porém, quando um éxciton livre se liga a uma impureza aceitadora ou doadora que esteja presente no material, este forma um complexo excitônico positivo ou negativo (dependendo do tipo de impureza). A estes complexos dá-se o nome de éxciton ligado. Neste trabalho serão estudados apenas os éxcitons livres.

2.4 FORMAÇÃO E RECOMBINAÇÃO DE ÉXCITONS EM SEMI-CONDUTORES BULK

A Figura 2.3 mostra a estrutura de bandas de um material semiconductor de "gap" direto ($k = 0$) em $T = 0 K$. Nessa temperatura os elétrons ocupam todos os níveis na

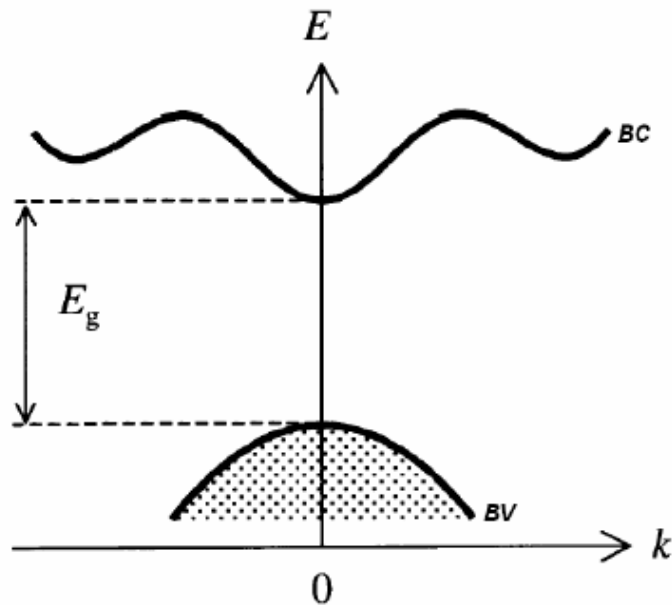


Figura 2.3 – Estrutura de bandas de um semiconductor em $T = 0 K$. Os elétrons ocupam todos os estados na banda de valência (BV). A próxima banda disponível, a banda de condução (BC), possui estados completamente vazios e entre as duas bandas há uma energia de “gap” (E_g).

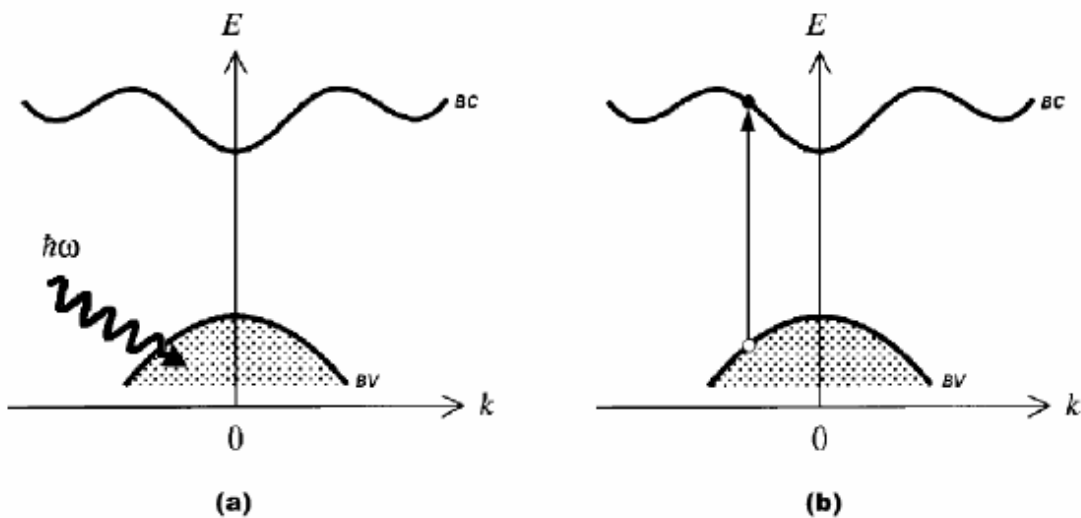


Figura 2.4 – (a) Interação de fótons, com energia $\hbar\omega > E_g$, com elétrons da BV (b) Excitação de um elétron da BV para a BC, deixando um buraco na BV.

banda de valência (BV), deixando-a completamente cheia. Com esta configuração, não há a possibilidade de haver condução elétrica no material, visto que os próximos estados disponíveis para a condução se encontram na banda de condução (BC). Porém, para o elétron ser promovido para esta banda é necessário que adquira uma energia maior ou igual à energia de "gap" ($\hbar\omega > E_g$). Quando um elétron da BV for excitado com um quantum de energia ($\hbar\omega$) maior que a energia de "gap" (E_g), este elétron será promovido para a BC e deixará um estado vago na BV, que é o buraco (Fig. 2.4). Agora, com a aplicação de um simples campo elétrico externo, tanto o elétron, que está na BC, quanto o buraco, que está na BV, contribuem para a condução elétrica no material, pois há estados de energia vagos nas duas bandas.

Quando os portadores se encontram no estado de mínima energia ocorre a formação do éxciton. A interação de Coulomb entre o par faz com que ocorra o surgimento de níveis de energia excitônicos, imediatamente abaixo da BC, níveis estes que são semelhantes à níveis formados em átomos monoelétrônicos. Os níveis criados são indexados pelo número quântico principal $n = 1, 2, 3$, sendo que $n = 1$ se refere ao estado fundamental e os demais: 2, 3, 4,... se referem aos estados excitados do éxciton.

Embora a situação descrita acima é uma situação idealizada, ela fornece uma boa visão da configuração do sistema como um todo. Em semicondutores reais, não é possível deixar o sistema em $T = 0 K$. Em temperaturas acima de $0 K$ os átomos da rede cristalina oscilam em torno de seu ponto de equilíbrio. Essas oscilações fazem com que a rede vibre, e aos dessas vibrações dá-se o nome de fônons. A energia gerada por esses fônons também é quantizada, $\hbar\omega_f$ (em que ω_f é a frequência do fônon), e estes (os fônons) também interagem com os portadores de carga (elétrons e buracos). Quando há esta interação, o resultado é uma diminuição da energia dos portadores através da relaxação deles para estados de energia cada vez menores, até chegarem no estado de mínima energia em suas respectivas bandas, isto é, o elétron relaxa para o fundo da BC e o buraco relaxa para o topo da BV (Fig. 2.5), através da emissão de fônons.

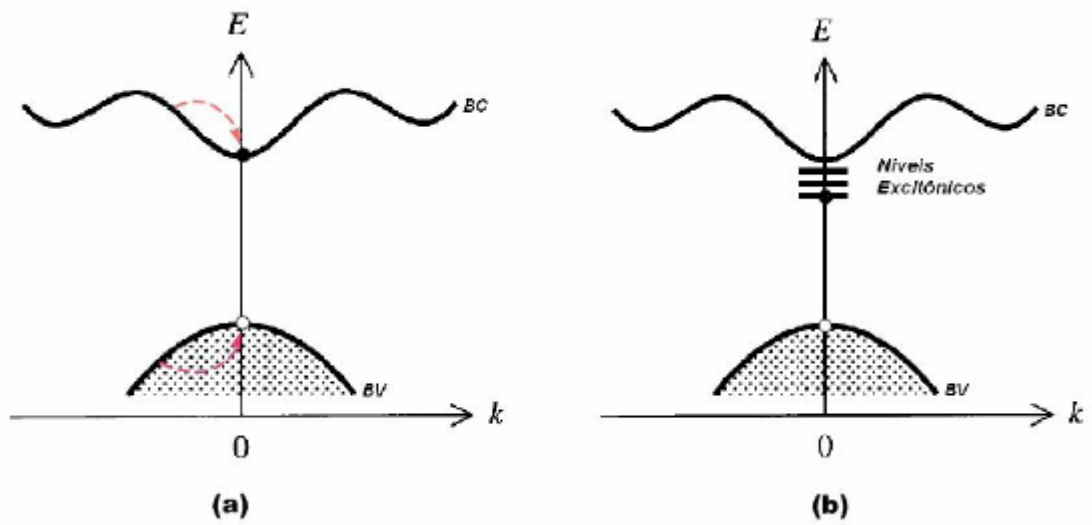


Figura 2.5 – (a) Relaxação dos portadores para o nível de mais baixa energia em suas respectivas bandas, (b) Formação do éxciton.

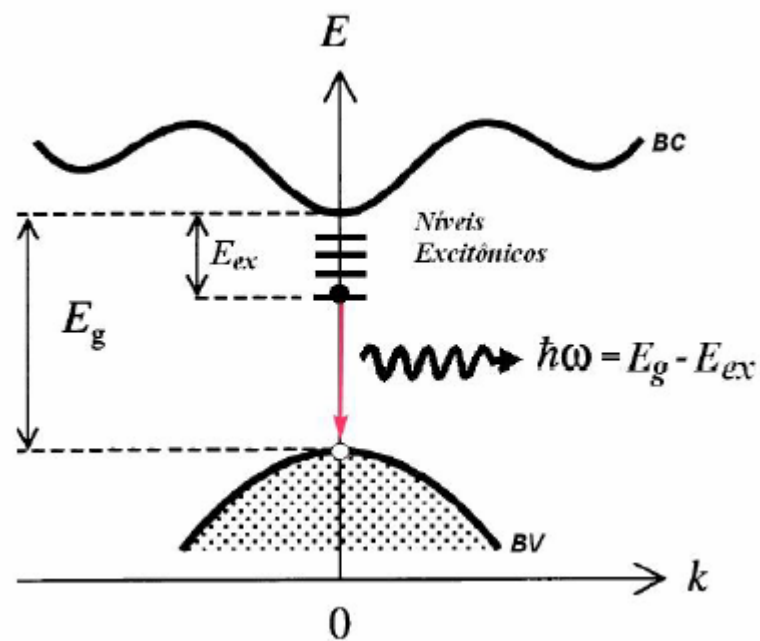


Figura 2.6 – Recombinação excitônica. O excesso de energia é emitido na forma de radiação eletromagnética, com energia $\hbar\omega = E_g - E_{exc}$

2.5 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 excitons de Wannier-Mott, da mesma forma que obtemos para o átomo de hidrogênio, fazendo apenas algumas modificações no Hamiltoniano, visto que o éxciton encontra-se imerso em um meio com constante dielétrica ε maior *que* um, e não mais no vácuo ($\varepsilon = 1$).

Partindo de um sistema com seis coordenadas espaciais retangulares $(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$ e uma coordenada temporal (t) , tem-se que a equação de Schrödinger para o sistema elétron-buraco, de massas efetivas m_e^* (massa do elétron) e m_h^* (massa do buraco), é dada por [29]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2(x_1, y_1, z_1) - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla^2(x_2, y_2, z_2) \right] \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) + V(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) \quad (2.2)$$

em que V é um potencial de interação que depende arbitrariamente de todas as seis coordenadas espaciais e da coordenada temporal. Porém, como o sistema é análogo à sistemas de átomos monoelétrônicos, o potencial de interação é o potencial de Coulomb. Como este depende somente das coordenadas relativas, ou seja, $V = V(x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2)$ uma importante simplificação pode ser feita na Eq. (2.2). Definindo as coordenadas relativas $x, y, e z$ por:

$$x = x_1 - x_2; \quad y = y_1 - y_2; \quad z = z_1 - z_2 \quad (2.3)$$

e as coordenadas do centro de massa \mathcal{X}, \mathcal{Y} e \mathcal{Z} por:

$$\mathcal{X} = \frac{m_e^* x_1 + m_h^* x_2}{M^*}; \quad \mathcal{Y} = \frac{m_e^* y_1 + m_h^* y_2}{M^*}; \quad \mathcal{Z} = \frac{m_e^* z_1 + m_h^* z_2}{M^*} \quad (2.4)$$

em que $M^* = m_e^* + m_h^*$ é a massa efetiva total do sistema elétron-buraco. Utilizando-se este novo conjunto de coordenadas, a Eq. (2.2) pode ser reescrita na forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2(x, y, z) \right] \Psi(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}, x, y, z) + V(x, y, z) \Psi(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}, x, y, z) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}, x, y, z) \quad (2.5)$$

em que

$$\mu^* = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \quad (2.6)$$

é a massa reduzida efetiva do sistema. Fazendo a seguinte suposição:

$$\Psi(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}, x, y, z, t) = U(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z})u(x, y, z)T(t) \quad (2.7)$$

e aplicando o método de separação de variáveis, obtém-se um conjunto de três equações:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u + Vu = Eu \quad (2.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 U = E'U \quad (2.9)$$

$$\frac{dT}{T} = -\frac{i}{\hbar}(E + E')dt \rightarrow T(t) = C \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + E')t\right] \quad (2.10)$$

em que C (Eq. (2.10)) é uma constante. A Eq. (2.8) descreve o movimento relativo do par elétron-buraco. Na aproximação de massa reduzida efetiva o par elétron-buraco é tratado como se este fosse uma única partícula, com massa reduzida μ , em uma energia potencial externa V . A Eq. (2.9) descreve o movimento do centro de massa do sistema. A ausência de um potencial de interação indica que o centro de massa do sistema elétron-buraco move-se com a partícula livre com a massa M . A Eq. (2.10), que possui solução trivial, descreve a evolução temporal do sistema como um todo, tanto do centro de massa, como da posição relativa entre o elétron e o buraco. Os auto-valores de energia E e E' , que correspondem ao conjunto de auto-estados da função de onda do sistema Ψ , são auto-valores de estados estacionários, visto que a relação entre as densidades de probabilidade é constante no tempo.

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 \equiv |\Psi(x, y, z)|^2 \quad (2.11)$$

Para o desenvolvimento deste trabalho, o interesse maior é com os auto-valores de energia E , associados com o movimento relativo das partículas. Portanto, para se obter os auto-valores de energia E é necessário resolver a Eq. (2.8). Como visto, esta equação descreve o movimento do par elétron-buraco interagindo via potencial de Coulomb. Como a energia potencial V deriva de uma força central com dependência radial r , torna-se conveniente utilizar-se o sistema de coordenadas esféricas, ao invés de coordenadas cartesianas, para estudar o problema. Estes dois sistemas de coordenadas se relacionam através do seguinte conjunto de equações:

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2; \quad x = r \sin(\theta) \cos(\phi); \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi); \quad z = r \cos(\theta) \quad (2.12)$$

Utilizando as equações acima, a parte espacial da função de onda da Eq. (2.8) sofre a seguinte transformação $[u(x, y, z) \rightarrow u(r, \theta, \phi)]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} u(r, \theta, \phi) \right) + \mathcal{L}^2 u(r, \theta, \phi) \right] + V(r) u(r, \theta, \phi) = E u(r, \theta, \phi) \quad (2.13)$$

onde \mathcal{L}^2 denota a parte diferencial do operador momento angular ($L^2 = -\hbar^2 \mathcal{L}^2$):

$$\mathcal{L}^2 = \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.14)$$

Visto que o potencial só apresenta dependência na parte radial, pode-se buscar uma solução para $u(r, \theta, \phi)$ do tipo:

$$u(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}(r) \mathbf{Y}(\theta, \phi) \quad (2.15)$$

Aplicando-se novamente o método de separação de variáveis é possível obter um conjunto de duas equações, uma para a parte radial do sistema, $\mathcal{R}(r)$, e outra para a parte angular do sistema, $\mathbf{Y}(\theta, \phi)$:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] \mathcal{R} = \lambda \mathcal{R} \quad (2.16)$$

$$-\mathcal{L}^2 \mathbf{Y} = \lambda \mathbf{Y} \rightarrow - \left[\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \mathbf{Y} = \lambda \mathbf{Y} \quad (2.17)$$

onde $\lambda = l(l+1)$ é a constante de separação e l é um inteiro positivo ou zero. A obtenção da expressão para λ vem a partir da solução da Eq. (2.17), que é a equação para a parte angular do sistema, cuja solução fornece os harmônicos esféricos. O auto-valor de energia para o n -ésimo estado, E_n , e o raio orbital para a n -ésima órbita, a_n , são obtidos a partir da solução da Eq.(2.16)(equação radial).

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu^*}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\varepsilon} \right)^2 \rightarrow E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu^*}{m_0 \varepsilon^2} \times R_y \quad (2.18)$$

e

$$a_n = n^2 \frac{\varepsilon \hbar^2}{e^2 \mu^*} \rightarrow a_n = n^2 \frac{m_0 \varepsilon}{\mu^*} \times a_B \quad (2.19)$$

em que n é o número quântico principal, m_0 é a massa do elétron no vácuo, $R_y = 13.6 \text{ eV}$ é a constante de Rydberg e $a_B = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$ é o raio de Bohr.

A partir dessas duas expressões, pode-se tirar algumas informações importantes a respeito do comportamento dos éxcitons em materiais "bulk": i) os auto-valores de energia E_n são negativos, isso quer dizer que os auto-estados correspondentes a estes auto-valores de energia são auto-estados ligados do sistema. Isso significa que, para que um éxciton se quebre é necessário fornecer uma certa quantidade de energia para o par elétron-buraco. 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 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 Eqs.(2.17) e (2.18) podem ser reescritas para este estado e, além disso, é conveniente fazer a seguinte mudança de notação:

$E_1 \rightarrow E_0$ e $a_1 \rightarrow a_0$, portanto:

$$E_1 = E_0 = -\frac{\mu^*}{m_0 \varepsilon^2} \times R_y \quad (2.20)$$

e

$$a_1 = a_0 = \frac{m_0 \varepsilon}{\mu^*} \times a_B \quad (2.21)$$

em que E_0 e a_0 representam, respectivamente, a energia de ligação excitônica em um material "bulk" e o raio da orbita para o estado de menor energia, estado 1S. R_y e a_B são, respectivamente, a constante Rydberg e o raio de Bohr.

Até este ponto, foi obtida apenas a energia de ligação de um éxciton imerso em um material semiconductor "bulk" de constante dielétrica ε . Porém, como visto na seção anterior, quando há a formação do éxciton em materiais semicondutores volumétricos, tem que se levar em conta a energia de "gap" do material. Portanto, a energia total deste sistema é:

$$E_T = E_g + E_{exc} \quad (2.22)$$

Como foi obtido pela Eq.(2.19), a energia de ligação excitônica é negativa, ou seja:

$$E_{exc} = -E_0 \rightarrow E_T = E_g - E_0 \quad (2.23)$$

Portanto, 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.

CAPÍTULO 3 – EXCITONS EM SÓLIDOS ANISOTRÓPICOS

3.1 INTRODUÇÃO

Conforme visto no Capítulo 2, o movimento relativo de um éxeton livre, em um sistema tridimensional (3D), pode ser descrito, usando a aproximação de massa efetiva, pela equação de Schrödinger em coordenadas esféricas (utilizando o sistema gaussiano de unidades):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{r} \right] \psi(\vec{r}) = E_T \psi(\vec{r}) \quad (3.1)$$

em que μ é a massa reduzida efetiva do éxeton, \vec{r} é o vetor de distância relativa entre o elétron e o buraco, ϵ é a constante dielétrica do meio e E_T é a energia total do sistema dada pela Eq. (2.22). Para um sólido isotrópico, a equação de Schrödinger acima é a equação do átomo de hidrogênio corrigida pelos parâmetros do meio.

Entretanto, para um sólido anisotrópico, cuja anisotropia é gerada pelo confinamento do sistema sobre os portadores de carga, a Eq. (3.1) não é suficiente para descrever o éxeton e suas propriedades, visto que as interações deste éxeton são anisotrópicas, ou seja, variam de acordo com a direção que este ocupa no meio. Para se descrever corretamente o éxeton e suas propriedades em um sólido anisotrópico é necessário introduzir um segundo potencial na Eq. (3.1), de maneira que este potencial responda pelas interações anisotrópicas do éxeton. Além disso, a massa reduzida efetiva varia com a direção cristalográfica, de forma que seria necessário introduzir uma função para descrever a variação dessa massa. Diante destas dificuldades, isto é, a introdução de um novo potencial, cuja forma é desconhecida, e de uma função, também desconhecida, para descrever o comportamento da massa reduzida efetiva, faria com que o cálculo se tornasse extremamente complicado e tedioso. Com isso, o desenvolvimento de um novo modelo que facilite o estudo do sistema, e ao mesmo tempo forneça resultados realísticos, torna-se necessário.

3.2 O MODELO DO ESPAÇO DIMENSIONAL FRACIONÁRIO

O modelo do espaço dimensional fracionário [30] permite que se estude a dinâmica de éxcitons anisotrópicos através da equação de Schrödinger em um espaço dimensional não inteiro, onde a dinâmica de excitação dos éxcitons é suposta acontecer em um ambiente isotrópico. Em outras palavras, o modelo permite transformar um sistema anisotrópico em um sistema isotrópico. Em contrapartida, o sistema passa a ser estudado não em uma dimensão inteira, como $2 - D$ ou $3 - D$, mas em uma dimensão fracionária $\alpha - D$, sendo que esta dimensão α determina o grau de anisotropia do sistema.

Para se estudar a equação de Schrödinger em um espaço não inteiro, o modelo utiliza o operador Laplaciano proposto por Stillinger [31]:

$$\nabla_{\alpha}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\alpha - 1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 (\sin \theta)^{\alpha-2}} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta)^{\alpha-2} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (3.2)$$

Utilizando esse operador, definido em um espaço de dimensão α , a equação de Schrödinger relevante para o éxciton assume a seguinte forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^{\alpha-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^{\alpha-1} \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2\mu} \frac{\mathcal{L}_{\alpha}^2}{r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right] \psi(r, \theta) = (E_T) \psi(r, \theta) \quad (3.3)$$

em que μ é a massa reduzida do éxciton, ϵ é a constante dielétrica do meio e \mathcal{L}_{α}^2 , dado por:

$$\mathcal{L}_{\alpha}^2 = -\frac{\hbar^2}{(\sin \theta)^{\alpha-2}} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[(\sin \theta)^{\alpha-2} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \quad (3.4)$$

corresponde ao operador momento angular. A dimensão fracionária α é uma dimensão do sólido e, para o propósito deste trabalho, fica restrita ao intervalo $2 \leq \alpha \leq 3$. A variável r , o raio do éxciton, restringe-se ao intervalo $0 < r < \infty$ e o ângulo θ , medido relativamente a um dos eixos que passa pela origem, restringe-se ao intervalo $0 \leq \theta \leq \pi$. A coordenada ϕ não entra na expressão do laplaciano pois esta independe do grau de confinamento dos portadores.

Através da solução da Eq.(3.1), as propriedades físicas de um éxciton podem ser obtidas como uma função da dimensionalidade espacial α , ou grau de anisotropia do sistema.

3.3 ESTADOS LIGADOS DE ENERGIA

A Equação (3.1), que é a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio num espaço $\alpha - D$, é separável nas partes radial $R(r)$ e angular $\Theta(\theta)$, ou seja:

$$\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta) \quad (3.5)$$

Através de alguma manipulação matemática, chega-se às equações para $R(r)$ e $\Theta(\theta)$ [30]:

$$R''(r) + \frac{\alpha - 1}{r}R' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[(E - E_g) + \frac{1}{\varepsilon} \frac{e^2}{r} \right] - \frac{l(l + \alpha - 2)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (3.6)$$

e

$$\Theta''(\theta) + (\alpha - 2) \cot(\theta)\Theta'(\theta) + l(l + \alpha - 2)\Theta(\theta) = 0 \quad (3.7)$$

A parte das auto-energias está toda embutida na equação para a parte radial. Então, a partir da solução desta equação, obtém-se duas quantidades de interesse do sistema: as auto-energias E_n [30],

$$E_n = E_g - \frac{E_0}{\left[n + \frac{\alpha - 3}{2} \right]^2} \quad (3.8)$$

e o raio orbital a_n :

$$a_n = \left[n + \frac{\alpha - 3}{2} \right]^2 a_0 \quad (3.9)$$

em que $n = 1, 2, 3, \dots$, é o número quântico principal, aêa dimensionalidade do sistema, E_0^* e a_0^* são, respectivamente, a energia de ligação (Eq. 2.20) e o raio do éxciton (Eq. 2.21) no material "bulk". Deve ser notado que os auto-estados de energia ligada dependem somente do número quântico principal e que a degenerescência para $2 \leq \alpha \leq 3$ é a mesma. Quando $\alpha = 3$, as Eqs. (3.12) e (3.13) representam, respectivamente, o espectro de energia e o raio das órbitas do éxciton imerso em um meio de constante dielétrica ε (Eqs. (2.18) e (2.19)).

3.3.1 Comportamento do Raio Orbital e da Energia em Função da Dimensionalidade do Sistema

Na Equação (3.8), a parcela da energia que nos interessa é dada por:

$$E_b = - \frac{E_0^*}{\left[n + \frac{\alpha - 3}{2} \right]^2} \quad (3.10)$$

em que E_b é definido como sendo a energia de ligação do éxciton num sólido de dimensão fracionária α . Nota-se que esta energia é negativa, enfatizando o estado ligado do sistema.

Como a energia de ligação e o raio do éxciton são sensíveis à dimensão do sistema, é interessante graficar essas duas quantidades em função da dimensão α . Como o estado de maior relevância para as transições ópticas a baixas temperaturas é o estado fundamental do éxciton, estado ($1s$), é conveniente reescrever as Eqs. (3.8) e (3.9) para este estado:

$$E_{1s} = - \left[\frac{2}{\alpha - 1} \right]^2 E_0^* \quad (3.11)$$

$$a_{1s} = \left[\frac{\alpha - 1}{2} \right]^2 a_0^* \quad (3.12)$$

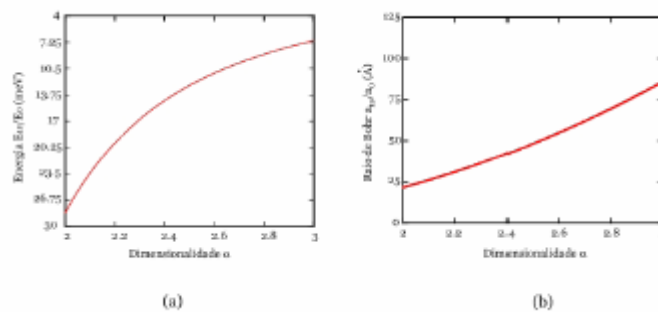


Figura 3.1 – Comportamento do raio a_{1s} (a) e da energia de ligação E_{1s} (b) para o éxciton no estado fundamental ($1s$) em função da dimensionalidade α do sistema.

A Figura 3.1 mostra dois gráficos que descrevem o comportamento da energia de ligação e do raio orbital para o estado $1S$ do éxciton em função da

dimensionalidade α do sistema. Analisando estes gráficos, nota-se que, quando $\alpha = 3$, $E_{1s}^{3D} = E_0^*$ e quando $\alpha = 2$, $E_{1s}^{2D} = 4E_0^*$. Este aumento na energia de ligação, E_b , se deve ao fato de que quando o sólido tem sua dimensão reduzida de $3D$ para $2D$, o par elétron-buraco fica mais coeso, resultando numa diminuição de seu raio, a_{1s} . Conseqüentemente, devido a essa redução, sua energia de ligação aumenta. No caso $3D$, o movimento do éxciton não possui restrição alguma; por outro lado, no caso $2D$ o éxciton fica totalmente restrito a se mover apenas em um plano. Esse aumento na energia de ligação do éxciton, devido à redução da dimensionalidade do sistema, torna atrativo o estudo de sistemas de baixas dimensionalidades, como poços quânticos simples e duplos. Para uma melhor compreensão da redução do raio do éxciton com a dimensionalidade, é interessante analisar a densidade radial de probabilidade em função da dimensionalidade α para o estado $1S$ do éxciton.

CAPÍTULO 4 – ÉXCITONS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS

4.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será estudada a dinâmica de éxcitons em campos magnéticos. Será visto, detalhadamente, como o campo magnético interage com o éxciton e altera sua energia de ligação. Porém, antes de se fazer o estudo deste sistema complexo, é conveniente estudar um sistema mais simples como, por exemplo, o de uma partícula carregada em um campo magnético, para que a dinâmica do sistema fique bem estabelecida e compreendida. Os formalismos *Lagrangeano* e *Hamiltoniano* fornecem uma boa descrição clássica desta dinâmica. Além disso, obtida a *função Hamiltoniana* do sistema, e utilizando as regras de quantização da mecânica quântica, torna-se mais simples obter o *operador Hamiltoniano* do sistema. Utilizando este operador, será feito um estudo dos níveis de *Landau*, que são gerados quando se submete uma partícula carregada a um campo magnético.

Estando bem estabelecida a dinâmica de uma partícula carregada em um campo magnético, tanto classicamente quanto quanticamente, o estudo do éxciton, interagindo com este mesmo campo, torna-se mais simples.

4.2 PARTÍCULA CARREGADA EM UM CAMPO MAGNÉTICO - FORMALISMO CLÁSSICO

4.2.1 Formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano

A mecânica Newtoniana tem por base a descrição do sistema em um intervalo de tempo infinitesimal dt , imediatamente após um tempo inicial t_i . As equações de movimento são descritas pela segunda lei de Newton [32]:

$$m\ddot{x}_i = F_i = -\frac{\partial}{\partial x_i}\mathcal{V}(x_i) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.1)$$

em que m é a massa da partícula, x_i são as coordenadas e \mathcal{V} é o potencial de interação ao qual a partícula está sujeita.

Já a mecânica *Lagrangeana* tem por base uma descrição global do sistema entre dois instantes de tempo, um inicial t_i e um final t_f . As equações de movimento, também conhecidas como equações de *Euler-Lagrange*, podem ser obtidas a partir do princípio variacional de *Hamilton*, e são dadas por [32]:

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i} \right] - \frac{\partial \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)}{\partial q_i} = 0 \quad (4.2)$$

em que \mathcal{L} é a função *Lagrangeana* do sistema, definida como:

$$\mathcal{L} = T - \mathcal{V} \quad (4.3)$$

em que T e \mathcal{V} são, respectivamente, as energias cinética e potencial do sistema. A *Lagrangeana* de um sistema é uma função das variáveis q_i e \dot{q}_i , que são, respectivamente, as coordenadas e as velocidades generalizadas do sistema. Outra quantidade de interesse do sistema é o momento generalizado ou *momento canônico* p_i , conjugado à coordenada q_i , dado por [32]:

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (4.4)$$

Neste formalismo, leis de conservação são obtidas facilmente. Seja, por exemplo, uma *Lagrangeana* que dependa de uma certa velocidade generalizada \dot{q}_i , mas não de sua coordenada correspondente q_i . Nesta configuração, q_i torna-se uma coordenada cíclica do sistema. Logo, o momento canônico conjugado à coordenada q_i é conservado:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (4.5)$$

Outro formalismo de interesse para descrever sistemas físicos, é o formalismo *Hamil-toniano*. Diferentemente do formalismo *Lagrangeano*, cujas variáveis independentes são as coordenadas q_i e as velocidades \dot{q}_i , no formalismo *Hamiltoniano* as variáveis independentes se tornam as coordenadas generalizadas q_i e os momentos generalizados p_i . A transformação de um formalismo em outro

$$\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i) \rightarrow \mathcal{H}(q_i, p_i) \quad (4.6)$$

pode ser obtida, por exemplo, a partir de uma transformação de *Legendre* sobre a *Lagrangeana* \mathcal{L} , resultando na *Hamiltoniano*, \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}(q_i, p_i) = \sum [p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i)] \quad (4.7)$$

As equações do movimento, denominadas *equações canónicas*, podem ser obtidas a partir de (4.7), e são dadas por:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \dot{p}_i \quad (4.9)$$

A diferença entre os dois formalismos é bem definida. No formalismo *Lagrangeano* o sistema é descrito por uma equação de segunda ordem (Eq 4.5), cujas variáveis independentes são as coordenadas generalizadas q_i e as velocidades generalizadas \dot{q}_i . Já no formalismo *Hamiltoniano* o sistema é descrito por duas equações de primeira ordem (Eqs. 4.8 e 4.9), e as variáveis independentes são as coordenadas generalizadas q_i e os momenta generalizados p_i . Tendo uma visão geral destes formalismos, pode-se agora descrever a dinâmica de uma partícula carregada em um campo magnético.

4.2.2 Lagrangeana e Hamiltoniana Eletromagnética

Classicamente, a força sobre uma partícula carregada em um campo elétrico e um campo magnético é dada, pela força de *Lorentz*(no sistema *CGS* de unidades):

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \quad (4.10)$$

em que q é a carga da partícula, v é a sua velocidade, c é a velocidade da luz (que aparece como um fator de correção de unidades), \mathbf{E} e \mathbf{B} são os campos elétrico e magnético, respectivamente. A força de *Lorentz* é diferente de forças conservativas, como por exemplo a *Coulombiana*, pois ela depende da velocidade da partícula. Fisicamente isso implica que a força não pode ser representada pelo gradiente de um potencial. Conseqüentemente, a *Lagrangeana* de uma partícula em um campo elétrico e um campo magnético não pode ser escrita simplesmente como na Eq.(4.3). A *Lagrangeana* correta, que descreve uma partícula carregada em um campo elétrico e um magnético é dada por [32]:

$$\mathcal{L}_{e.m} = \frac{1}{2}m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - q\phi + \frac{q}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (4.11)$$

em que m é a massa da partícula, q é a sua carga, $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ é a sua velocidade, ϕ é o potencial *Coulombiano*, \mathbf{A} é o potencial vetor e c é a velocidade da luz. Os potenciais ϕ e \mathbf{A} se relacionam com os campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} pelas seguintes equações do eletromagnetismo:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad (4.12)$$

e

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.13)$$

As Equações de *Euler-Lagrange* (4.2), correspondentes à *Lagrangeana* (4.11), são:

$$\frac{d}{dt} \left(m\dot{x}_i + \frac{q}{c}A_i \right) = -q\frac{\partial\phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c}\frac{\partial(\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{A}})}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.14)$$

Combinando as três equações acima em uma forma vetorial, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \left(m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right) = -q\nabla\phi + \frac{q}{c}\nabla(\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{A}}) \quad (4.15)$$

A partir desta última, o momento canônico conjugado \mathbf{p} (Eq.4.4) é dado por [32]:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \quad (4.16)$$

A $\mathcal{L}_{e.m}$ não possui a forma característica $\mathcal{T} - \mathcal{V}$, pois a quantidade

$$\mathcal{U} = q\phi - \frac{q}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (4.17)$$

algumas vezes denominada de *potencial generalizado* não pode ser interpretada como a energia potencial de uma partícula carregada em um campo eletromagnético. Em primeiro lugar, a força devido a um campo eletromagnético dependente do tempo geralmente não é conservativa e não admite uma função trabalho independente da trajetória para desempenhar o papel de um potencial. Até mesmo em casos especiais, quando a força é conservativa, somente $q\phi$ pode ser interpretado como uma energia potencial devido ao campo elétrico. O termo

$$-\frac{q}{c}(\mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{A}}) \quad (4.18)$$

não representa a energia potencial magnética, pois a força magnética

$$\mathbf{F}_B = \frac{q}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.19)$$

nunca realiza trabalho, visto que esta é sempre perpendicular à velocidade. Portanto, para incluir forças, tais como a eletromagnética, é preciso redefinir a *Lagrangeana* do sistema, para que esta possa descrever corretamente a sua dinâmica, quando substituída em (4.2).

A partir da definição da $\mathcal{L}_{e.m.}$, pode-se definir a *Hamiltoniana eletromagnética* ($\mathcal{H}_{e.m.}$) através da Eq. (4.7). A transformada de Legendre independe da natureza da força, portanto, se $\mathcal{L}_{e.m.}$ descrever corretamente a dinâmica do sistema, a sua transformada $\mathcal{H}_{e.m.}$ também o fará. A partir das Eqs (4.7, 4.11 e 4.16) determina-se a *Hamiltoniana* do sistema [32]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e.m.} &= \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - \mathcal{L}_{e.m.} \\ &= m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{q}{c}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \frac{1}{2}m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q\phi - \frac{q}{c}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q\phi \\ &= T + q\phi \end{aligned} \quad (4.20)$$

Diferentemente da Eq. (4.11), cujo potencial vetor \mathbf{A} aparece explicitamente $\mathcal{L}_{e.m.}$, no formalismo *Hamiltoniano* isto não ocorre de imediato. Porém, como discutido anteriormente, se a $\mathcal{L}_{e.m.}$ descreve corretamente a dinâmica do sistema, a $\mathcal{H}_{e.m.}$ também o faz. Então, como a $\mathcal{H}_{e.m.}$ descreve a dinâmica correta do sistema sem saber o significado de \mathbf{A} ? A resposta para esta pergunta é muito simples, e está nas coordenadas que descrevem o sistema. Como já discutido, a *Hamiltoniana* é uma função dos momenta generalizados \mathbf{p} e das coordenadas generalizadas \mathbf{q} , portanto, reescrevendo a Eq (4.19) em termos de \mathbf{p} e \mathbf{q} tem-se:

$$\mathcal{H}_{e.m.} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \quad (4.21)$$

que é a *Hamiltoniana* de uma partícula carregada em um campo eletromagnético, no formalismo *Hamiltoniano*.

4.3 PARTÍCULA CARREGADA EM UM CAMPO MAGNÉTICO - FORMALISMO QUÂNTICO

Na teoria clássica, a função *Hamiltoniana* de uma partícula carregada em um campo eletromagnético é dada por [32]:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\phi \quad (4.22)$$

em que m e q são, respectivamente, a massa e a carga da partícula, \mathbf{P} é o momento geral da partícula, \mathbf{A} é o potencial vetor, ϕ o potencial escalar e c a velocidade da luz. A transição da mecânica clássica para a mecânica quântica é feita da maneira usual, ou seja, substituindo o momento generalizado p pelo operador momento \hat{p} e a coordenada generalizada q_i pelo operador posição \hat{q}_i :

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \quad \text{e} \quad q_i \rightarrow \hat{q}_i \quad (4.23)$$

Com essas modificações, obtém-se o operador *Hamiltoniano* $\hat{\mathcal{H}}$ do sistema, dado por [33]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + q\phi \quad (4.24)$$

O operador posição \hat{q} não aparece explicitamente em $\hat{\mathcal{H}}$, porém, na mecânica clássica, tanto o potencial vetor \mathbf{A} quanto o potencial de Coulomb são funções da posição, ou seja:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{A}(q_i, t) \\ \phi &= \phi(q_i, t) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Dessa forma, no operador *Hamiltoniano*, essas duas quantidades se tornam operadores também. Outro aspecto importante da Eq.(4.24) é que ela representa o *Hamiltoniano* de uma partícula carregada em um campo eletromagnético. Como, por enquanto, é de interesse apenas o estudo de uma partícula carregada em um campo magnético externo \mathbf{B} , pode-se omitir o termo $-q\phi$ em (4.24), resultando em:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{q}}, t) \right]^2 \quad (4.26)$$

O *Hamiltoniano* (4.26) não leva em conta o fato da partícula possuir *spin*. Se este for levado em conta ele não é suficiente para descrever todas as interações sistema. Isso se deve ao fato de que o momento magnético intrínseco da partícula interage diretamente com o campo magnético aplicado. No formalismo clássico essa interação não aparece, uma vez que o *spin* é um efeito puramente quântico e anula-se no limite da teoria clássica. A expressão correta para o *Hamiltoniano* é obtida introduzindo-se em (4.26) um termo extra $(-\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B})$, o qual corresponde à energia do momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ no campo \mathbf{B} . Neste trabalho o *spin* da partícula não é relevante, assim, qualquer efeito de *spin* ou momento magnético intrínseco será omitido.

A maneira mais direta de se obter os níveis de energia do sistema, que são os auto valores do operador $\hat{\mathcal{H}}$, é reescrever este operador em termos das componentes do operador velocidade $\hat{\mathbf{q}}$. Para tal, é preciso, primeiramente, obter a forma operatorial de q_i e estudar suas propriedades. Da mecânica clássica tem-se a seguinte relação [32]:

$$\hat{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}\} = \frac{\partial q_i}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial q_i}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (4.27)$$

em que $\{q_i, \mathcal{H}\}$ é definido como o *Colchete de Poisson* (BP) entre as variáveis q_i e \mathcal{H} . Essa nova quantidade, o BP, assim como a energia e o momento generalizado, pode ser conservada. Na mecânica quântica, essa relação assume a seguinte forma [33]:

$$\hat{q}_i = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{q}_i \right] \quad (4.28)$$

em que $\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{q}_i \right]$ é definido como o comutador do operador $\hat{\mathcal{H}}$ com o operador \hat{q}_i (que é uma componente do operador posição $\hat{\mathbf{q}}$). Fisicamente, o comutador entre dois observáveis quaisquer \hat{A} e \hat{B} (números obtidos do sistema por meio de uma medida) fornece as seguintes informações: se o observável \hat{A} não comuta com o observável \hat{B} , ou seja, se $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] \neq 0$, então o observável \hat{A} não pode ser medido sem que haja uma perturbação no valor do observável \hat{B} . Já operadores que comutam, ou seja, $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = 0$ podem ser medidos independentemente ou simultaneamente, sem que a medida de um deles perturbe a medida do outro.

O operador velocidade \hat{q}_i é dado pela *relação de comutação* entre $\hat{\mathcal{H}}$ e \hat{q} :

$$\begin{aligned}\hat{q}_i &= \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{q}_i] \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left[\left(\hat{p}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i(\hat{q}_i, t) \right)^2, \hat{q}_i \right] \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left(\hat{p}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i(\hat{q}_i, t) \right) \quad (i = x, y, z)\end{aligned}\quad (4.29)$$

Embora seja matematicamente mais fácil de se trabalhar com o operador momento (linear) (\hat{p}), o operador velocidade (\hat{q}) possui um significado físico mais direto. Nesse aspecto, torna-se conveniente fazer uma análise de suas propriedades. O comutador entre \hat{q}_i e \hat{q}_j é dado por:

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = i \frac{\hbar}{m^2 c} \delta_{ij} \quad (i = x, y, z) \text{ e } (j = x, y, z) \quad (4.30)$$

em que δ_{ij} , é o delta de Kronecker, dado por:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (4.31)$$

Exceto pelo fator m , a massa da partícula, esse resultado é o mesmo que se obtém fazendo-se o comutador do operador posição \hat{q} com o operador momento \hat{p} . Entretanto, o comutador entre as componentes do operador velocidade apresenta um resultado interessante. De forma geral, o comutador entre duas componentes quaisquer do operador velocidade é dado por [33]:

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = i \frac{\hbar q}{m^2 c} \varepsilon_{ijk} B_k \quad (i = x, y, z), (j = x, y, z) \text{ e } (k = x, y, z) \quad (4.32)$$

em que ε_{ijk} é o tensor anti-simétrico de Levi-Civita, dado por:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j, k), (k, i, j) \text{ ou } (j, k, i) \\ -1 & \text{se } (k, j, i), (i, k, j) \text{ ou } (j, i, k) \\ 0 & \text{se houver componentes repetidas} \end{cases} \quad (4.33)$$

e B_k é a componente do campo magnético ao longo da direção perpendicular às velocidades e \hat{q}_i e \hat{q}_j . O comutador de duas componentes da velocidade é proporcional à componente do campo magnético \mathbf{B} que esta orientada na mesma direção da terceira componente da velocidade. Esse resultado é bem valioso, pois se o campo magnético for dado, por exemplo, por:

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{z} \quad (4.34)$$

o qual pode ser gerado, por exemplo, por um potencial vetor com a seguinte forma:

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = \frac{B_0}{2}(-y\hat{x} + x\hat{y}) \quad (4.35)$$

obtem-se os seguintes resultados para a Eq. (4.31):

$$[\hat{q}_x, \hat{q}_y] = i \frac{\hbar q}{m^2 c} B_z; \quad [\hat{q}_z, \hat{q}_x] = [\hat{q}_y, \hat{q}_z] = 0 \quad (4.36)$$

ou seja, as velocidades \hat{q}_x e \hat{q}_y não podem ser medidas simultaneamente, ao passo que tanto \hat{q}_z e \hat{q}_x quanto \hat{q}_y e \hat{q}_z podem. Por hora este resultado parece vago, porém, tornar-se-á útil mais adiante.

Com o operador velocidade determinado, bem como suas propriedades investigadas, é possível reescrever o $\hat{\mathcal{H}}$ (4.26) em termos de \hat{q}_x , \hat{q}_y e \hat{q}_z . Primeiramente, separa-se o *Hamiltoniano* em duas partes, do seguinte modo:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{xy} + \mathcal{H}_z \quad (4.37)$$

ou seja, $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ descreve a dinâmica da partícula no plano xy , enquanto que $\hat{\mathcal{H}}_z$ descreve a dinâmica da partícula ao longo da direção do campo aplicado. Utilizando-se o operador velocidade (4.29), os operadores $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ e $\hat{\mathcal{H}}_z$, e conseqüentemente $\hat{\mathcal{H}}$, podem ser reescritos na forma:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{xy} + \mathcal{H}_z = \frac{1}{2m} (\hat{q}_x^2 + \hat{q}_y^2) + \hat{q}_z^2 \quad (4.38)$$

Para $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, obtém-se, da relação acima, o seguinte resultado:

$$[\mathcal{H}_{xy}, \mathcal{H}_z] = 0 \quad (4.39)$$

Em termos físicos, esta relação diz que os auto-valores de $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ e $\hat{\mathcal{H}}_z$ podem ser determinados independentemente e, portanto, o auto-valor de $\hat{\mathcal{H}}$ resume-se apenas à soma dos auto-valores de $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ e $\hat{\mathcal{H}}_z$.

Introduzindo a notação:

$$\gamma = \left(\frac{\hbar q B}{m^2 c} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.40)$$

as velocidades \hat{q}_x e \hat{q}_y podem ser expressadas como:

$$\hat{q}_x = \gamma \hat{W}; \quad \hat{q}_y = \gamma \hat{K} \quad (4.41)$$

em que \hat{W} e \hat{K} são operadores, e obedecem a seguinte relação de comutação:

$$[\hat{W}, \hat{K}] = i \quad (4.42)$$

Com essa notação, a equação para $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ assume a seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{H}}_{xy} = \frac{1}{2} \frac{\hbar q B}{m c} (\hat{W}^2 + \hat{K}^2) \quad (4.43)$$

A equação para $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ é a equação de um *oscilador harmônico* e, portanto, os auto-valores de $\hat{\mathcal{H}}_{xy}$ são dados por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (4.44)$$

em que $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ é um inteiro não negativo e ω_c é a frequência de ciclotrón da partícula, ou seja, a frequência de oscilações que a partícula realiza no plano xy devido a influência que o campo magnético \mathbf{B} exerce sobre ela, e é dada por:

$$\omega_c = \frac{q B}{m c} \quad (4.45)$$

Os auto-valores para $\hat{\mathcal{H}}_z$ são trivialmente obtidos a partir de \hat{q}_z :

$$\hat{q}_z = \frac{\hat{p}_z}{2} - \frac{q}{m c} \hat{A}_z \quad (4.46)$$

Visto que o termo A_z é nulo (Eq. 4.33), o *Hamiltoniano* que descreve a dinâmica da partícula ao longo do eixo de aplicação do campo magnético é dado por:

$$\hat{\mathcal{H}}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \quad (4.47)$$

que nada mais é que o *Hamiltoniano* de uma partícula livre, possuindo um espectro de energia contínuo, dado por:

$$E(\dot{q}_z) = \frac{1}{2}m\dot{q}_z^2 \quad (4.48)$$

Portanto, os auto-valores de energia para uma partícula carregada em um campo magnético uniforme e estático $\mathbf{B} = B_0\hat{z}$ são dados por [33]:

$$E_n(\dot{q}_z) = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{1}{2}m\dot{q}_z^2 \quad (4.49)$$

Estes níveis de energia também são conhecidos como níveis de Landau, nome dado em homenagem ao físico russo Lev Landau que chegou à esta expressão na década de 30.

Os potenciais vetor \mathbf{A} e escalar ϕ , que entram nas funções *Lagrangeana* e *Hamiltoniana*, e conseqüentemente no operador *Hamiltoniano* $\hat{\mathcal{H}}$, relacionam-se com os campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} através das seguintes equações:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad (4.50)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.51)$$

Contudo, estes potenciais não são únicos. Os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} permanecem inalterados por uma transformação do tipo:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \quad (4.52)$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} \quad (4.53)$$

em que $\chi = \chi(q_i, t)$ é uma função escalar. Essa mudança nos potenciais *escalar* e *vetorial* é denominada *transformações de Gauge*, e não gera qualquer efeito sobre qualquer resultado físico do sistema. Para a mecânica quântica existe ainda uma terceira substituição que também deixa o sistema inalterado. É uma transformação do tipo:

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \Psi \exp\left(\frac{i\phi}{\hbar c}\right)\chi \quad (4.54)$$

em que $\chi = \chi(q_i, t)$ é uma função escalar arbitrária. Sendo que o módulo quadrado da função de onda, $|\Psi(q_i, t)|^2$, tem o significado de *densidade de probabilidade*, isso implica que somente a fase da função de onda complexa, $\Psi(q_i, t)$, pode ser afetada por esta transformação.

4.4 EXCITONS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS

Na presença de um campo magnético, a energia de transição interbanda, no material "bulk", é dada por uma expressão do tipo:

$$E_T = E_G + E_X(B) \quad (4.55)$$

em que E_G é a energia de "gap" do material e $E_X(B)$ é a energia do estado fundamental do éxciton, e varia de acordo com a intensidade do campo magnético aplicado.

O movimento de um par elétron-buraco, opticamente excitado, sob a influência de um campo magnético \mathbf{B} é determinado por um potencial efetivo que é composto por dois termos: um de interação de Coulomb, que responde pela energia de ligação entre o par (energia de ligação excitônica), e outro de interação magnética, que responde pela energia de ciclotron dos portadores. Considerando o sistema apenas sobre a influência do potencial gerado pelo campo magnético, as auto-energias dos portadores seriam os níveis de Landau, que são níveis de energia gerados pela interação de uma única partícula carregada com o campo magnético \mathbf{B} (como visto na seção 4.3). Por outro lado, se o sistema for colocado apenas sobre a influência do potencial de Coulomb, os portadores de carga formarão uma estrutura ligada, o éxciton, cujos níveis de energia são característicos de sistemas hidrogenóides (como visto na seção 2.5). A questão pertinente a ser discutida é: como se comportarão os níveis de energia do éxciton, E_X , na presença de um potencial efetivo, composto pelos potenciais de Coulomb e magnético? A resposta para esta pergunta não é tão trivial, e dependerá muito de quão intenso é o campo magnético aplicado. Dessa forma, a resposta para esta pergunta será dada em duas partes: a primeira é considerando-se campos

magnéticos de baixa intensidade, e a segunda é considerando-se campos magnéticos de alta intensidade.

4.4.1 Éxcitons em Campos de Baixa Intensidade

Em campos de baixa intensidade o potencial de Coulomb é muito mais intenso do que o potencial magnético e, dessa forma, a energia de ligação excitônica E_b é muito mais forte do que a energia de ciclotrón ($\hbar\omega_c/2$). Nessa situação, o potencial de Coulomb predomina sobre o sistema e o potencial magnético torna-se apenas uma perturbação. Assim, a configuração do sistema continuará a ser do tipo hidrogenóide, porém, seus níveis de energia serão perturbados pelo potencial magnético. Esta perturbação fará com que estes níveis se desloquem de uma quantidade ΔE_{dia} , que denomina-se deslocamento diamagnético, para regiões de maiores energias. Esse deslocamento dos níveis é responsável por um aumento na energia de transição óptica do material, visto que a energia de ligação excitônica permanece constante, e seu valor é dado pelo Rydberg efetivo (Eq. 2.18).

Existe uma competição entre os dois potenciais: o magnético faz com que os portadores de carga tentem se desvincular do potencial de Coulomb e ir para os níveis de Landau (níveis mais energéticos); entretanto, como o potencial de Coulomb é mais intenso, o sistema ainda se mantém ligado e com níveis característicos de sistemas hidrogenóides, porém, sendo deslocados de uma quantidade ΔE_{dia} . Por conseguinte, a energia do estado fundamental do éxciton, E_X , será constituída de dois termos: um positivo, ΔE_{dia} , que responde pela perturbação do potencial magnético, e um negativo, E_b , que nada mais é que a energia de ligação excitônica, gerada pelo potencial de Coulomb. Logo, a energia do estado fundamental do éxciton, E_X , é dada por:

$$E_X(B) = \Delta E_{dia} - E_b(0) \quad (4.56)$$

O deslocamento diamagnético dos níveis de energia, ΔE_{dia} , gerado pelo campo magnético, pode ser obtido via teoria de perturbação e é dada por [36]:

$$\Delta E_{dia}(B) = D_1 \frac{\varepsilon_0^2 \varepsilon^2 \hbar^4}{4\pi^2 q^2 \mu^3} B^2 \quad (4.57)$$

em que $\epsilon_0\epsilon$ é a permissividade do meio, μ é a massa reduzida efetiva do éxciton, q é a carga e B é a intensidade do campo magnético aplicado. O parâmetro D_1 está relacionado com a dimensionalidade do sistema, e varia dentro do seguinte limite de valores $3/16 \leq D_1 \leq 1$, sendo que $D_1 = 3/16$ representa um sistema perfeitamente bidimensional (2D) e $D_1 = 1$ representa um sistema perfeitamente tridimensional ("bulk") 3D. Portanto, de uma forma geral, a energia de transição interbanda, Eq. (4.55) pode ser reescrita como:

$$E_T = E_G + E_X(B) = E_G + \Delta E_{dia} - |E_b(0)| \quad (4.58)$$

em que $E_b(0)$ é o valor da energia de ligação excitônica na configuração de campo magnético nulo. Essa energia é pouco afetada por campos de baixa intensidade, sendo considerada como constante durante todo o regime de campos magnéticos de baixa intensidade.

4.4.2 Éxcitons em Campos Magnéticos de Alta Intensidade

O fato da energia E_b não variar para campos magnéticos de baixa intensidade provém do fato de que campos de baixa magnitude apenas conseguem perturbar a energia dos níveis excitônicos, mas não suas funções de onda. A influência do campo magnético sobre a função de onda excitônica é determinada pelo razão entre a energia de ciclotron e a energia de ligação excitônica [35]:

$$\zeta = \frac{\hbar\omega_c}{2E_b} = \frac{q\hbar}{2\mu E_b} B \quad (4.59)$$

em que ω_c é a frequência de ciclotron dos portadores, q é a carga, μ é a massa reduzida efetiva e B é a intensidade do campo magnético aplicado. No caso em que o regime de campo magnético é de baixa intensidade, $\zeta \ll 1$, há apenas uma perturbação dos estados excitônicos, mas dificilmente as funções de onda pertencentes aos estados serão perturbadas. Para que haja uma perturbação nas funções de onda dos estados é necessário que se tenha, pelo menos, $\zeta \approx 1$. A intensidade com que o campo magnético deve ser aplicado, para que esta condição seja satisfeita, dependerá da amostra em questão. No caso do *GaAs* "bulk" esta condição é satisfeita para um campo magnético com intensidade de $B \approx 4T$. Portanto, para

campos inferiores a $\approx 4T$ a energia de ligação excitônica é praticamente constante, já que a função de onda do estado é do tipo hidrogenóide, sendo determinada, essencialmente, pelo potencial de Coulomb. Entretanto, no limite de campos magnéticos de alta intensidade tem-se que $\zeta \gg 1$, e o potencial magnético tornase predominante sobre o sistema, de forma que os estados excitônicos e suas respectivas funções de onda mudarão drasticamente e abruptamente. Como o potencial magnético predomina sobre o sistema, ele levará os portadores para os níveis de Landau; porém, o potencial de Coulomb, embora menos intenso que o magnético, ainda está presente, e faz com que o par elétron-buraco ainda continue ligado, possibilitando a formação de éxcitons até mesmo nos estados de Landau. Quando o sistema encontra-se nesta configuração, o éxciton passa a ser denominado magnetoéxciton, justamente para diferenciá-lo do éxciton criado a partir de interação puramente de Coulomb.

A energia de ligação do magnetoéxciton, que continuará sendo representada por E_b , passará a depender da intensidade do campo magnético aplicado, tornando-se uma função deste. A energia de ligação dos magnetoéxcitons pode ser descrita por [36]:

$$E_b(B) \approx 3D_2 \left[\frac{\hbar q R_{ex} B}{2(2n_l + 1)\mu} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.60)$$

e, portanto, a energia do estado excitônico, E_X , pode ser dada por:

$$\begin{aligned} E_X(B) &= \left(n_l + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c - |E_b(B)| \\ \Rightarrow E_X(B) &= \left(n_l + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar q}{2\mu} B - |E_b(B)| \end{aligned} \quad (4.61)$$

em que q é a carga do elétron, $n_l = 0, 1, 2, \dots$ denota os estados de Landau, μ é a massa reduzida efetiva do éxciton, R_{ex} é o Rydberg efetivo para um éxciton $3D$ (Eq. 2.18) e D_2 é um parâmetro que descreve a dimensionalidade do sistema, e varia dentro do seguinte limite de valores $1/4 \leq D_2 \leq 1$, sendo que $D_2 = 1$ representa um sistema perfeitamente bidimensional ($2D$) e $D_2 = 1/4$ representa um sistema perfeitamente tridimensional ("bulk") $3D$. Portanto, a energia de transição interbanda, Eq. (4.55), no regime de campos magnéticos de alta intensidade, pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
E_T &= E_G + \left(n_l + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c - |E_b(B)| \\
\Rightarrow E_T &= E_G + \left(n_l + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar q}{2\mu} B - |E_b(B)|
\end{aligned} \tag{4.62}$$

O primeiro termo, E_G , refere-se à energia de “gap” do material, e é constante. O segundo termo, que é linear com o campo magnético, refere-se exclusivamente ao deslocamento dos níveis de Landau para regiões de maiores energia, em cada uma das bandas. Dessa forma, para $n_l = 0$, este termo assume a seguinte forma:

$$\left(n_l + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c = \frac{\hbar q}{2\mu} B \tag{4.63}$$

e este termo não depende da dimensionalidade do sistema e, portanto, não sofre qualquer correção referente ao tipo de sistema, seja “bulk” ou heteroestrutura. O terceiro termo à direita da Eq. (4.62) é um resultado direto da presença de magnetoéxciton no sistema. Isso é evidenciado pela dependência que este termo possui com Rydberg efetivo, que é a energia de ligação de um éxciton, gerado pelo potencial de Coulomb, em um sistema $3D$ (Eq. 2.18). Este termo necessita de uma correção quanto à dimensionalidade do sistema, visto que a energia de ligação excitônica varia de acordo com a dimensionalidade (como discutido na seção 3.3.1) do sistema, e esta correção está embutida no parâmetro D_2 .

4.5 DESLOCAMENTO DIAMAGNÉTICO NO FORMALISMO DO ESPAÇO DIMENSIONAL FRACIONÁRIO

Esta seção tem por objetivo fazer uma conexão entre o formalismo do espaço dimensional fracionário, discutida ao longo do capítulo 3, e a teoria por trás da interação do éxciton com o campo magnético, que resulta em um deslocamento diamagnético dos níveis excitônicos devido ao campo magnético. Esta conexão pode ser feita através dos parâmetros D_1 e D_2 , que caracterizam a dimensionalidade do sistema. Dessa forma, busca-se um modo de representar estes dois parâmetros como uma função da dimensionalidade efetiva do sistema, α , sendo que $2 < \alpha < 3$.

A conexão entre o parâmetro D_1 e a dimensionalidade a foi obtida por Tliilangan [40], que desenvolveu, dentro do formalismo do espaço dimensional fracionário proposto por He [30], uma expressão para o "deslocamento diamagnético" em função da dimensionalidade a análogo a um átomo de hidrogênio em um espaço a -dimensional, em que $2 \leq \alpha \leq 3$, Tliilangan obteve, para sistemas de campo magnético de baixa intensidade, a seguinte expressão para o "deslocamento diamagnético" [40]:

$$\Delta E(B) = 03.B^2 G(\alpha) \frac{(a_B \times 10^{-8} m^{-1})^2}{(100 m_e^{-1} \mu)} meV \quad (4.64)$$

em que B é a intensidade do campo magnético, a_B é o raio de Bohr, μ é a massa reduzida efetiva do éxciton e m_e é a massa do elétron no espaço livre e $G(\alpha)$ é uma função que responde pela dimensionalidade do sistema, e é dada por:

$$G(\alpha) = \frac{3(\alpha - 1)^4}{2^{(\alpha+1)} \alpha} \quad (4.65)$$

e obedece os seguintes limites:

$$\frac{3}{16} \leq G(\alpha) \leq 1 \quad \text{se} \quad 2 \leq \alpha \leq 3 \quad (4.66)$$

o que está totalmente de acordo com os limites do parâmetro D_1 ($3/16 \leq D_1 \leq 1$). Dessa forma, D_1 pode ser expresso em função de a :

$$D_1 \equiv G(\alpha) = \frac{3(\alpha - 1)^4}{2^{(\alpha+1)} \alpha} \quad (4.67)$$

Embora as Eqs. (4.64) e (4.57) possuam formas matemáticas diferentes, elas representam a mesma quantidade física do sistema, ou seja, o deslocamento diamagnético dos níveis de energia dos portadores gerado pelo campo magnético aplicado. A diferença matemáticas entre ambas é apenas uma consequência do formalismo matemático pelo qual estas expressões foram obtidas. A Equação (4.57) foi obtida via teoria de perturbação convencional; já a Eq. (4.64) foi obtida também via teoria de perturbação, porém utilizando-se o laplaciano proposto por Stillinger [31]. Por essa razão é possível fazer a comparação entre a função $G(\alpha)$ (Eq. 4.64) e o parâmetro D_1 (Eq. 4.57).

O parâmetro D_2 (Eq. (4.60)) também fornece informações sobre a dimensionalidade efetiva do sistema e, portanto, é de interesse fazer uma conexão entre este e a dimensionalidade efetiva a . A partir dos limites tomados pelo parâmetro D_2 ($1/4 \leq D_2 \leq 1$), é possível expressar a energia de ligação excitônica, em regime de campo magnético nulo, $E_b(0)$, em função do parâmetro D_2 e do Rydberg efetivo do éxciton, R_{ex} :

$$E_b(0) = -4D_2R_{ex} \quad (4.68)$$

de forma que $E_b(0)$ assume os seguintes valores quando toma-se os limites de D_2 :

$$-4R_{ex} \leq E_b(0) \leq -R_{ex} \quad \text{se} \quad \frac{1}{4} \leq D_2(\alpha) \leq 1 \quad (4.69)$$

Porém, esse resultado é o mesmo que se obtém pela Eq.(3.11). Portanto, comparando-se essas expressões:

$$E_b(0) = -4D_2R_{ex} \quad \text{e} \quad E_{1S} = -\left(\frac{2}{\alpha-1}\right)^2 R_{ex} \quad (4.70)$$

obtém-se que:

$$D_2 = \frac{1}{(\alpha-1)^2} \quad (4.71)$$

Embora a nomenclatura seja diferente, as Eq. (4.68) e (3.11) representam a mesma quantidade física, isto é, a energia de ligação excitônica do estado fundamental quando não há interação magnética.

A partir da conexão dos parâmetros D_1 e D_2 com a dimensionalidade efetiva α , as equações que fornecem a descrição da energia de emissão em função do campo magnético, tanto para campos de baixa intensidade quanto para campos de alta intensidade estão completas, e podem ser expressas como:

$$E_{T1} = E_g + \frac{3(\alpha-1)^4}{2^{(\alpha+1)\alpha}} \frac{\varepsilon_0^2 \varepsilon^2 h^4}{4\pi^2 q^2 \mu^3} B^2 - |E_b(0)| \quad (4.72)$$

para o regime de campos magnéticos de baixa intensidade, e

$$E_{T2} = E_g + \frac{1}{2} \frac{\hbar q}{\mu} B - \left| 3 \frac{1}{(\alpha - 1)^2} \left(\frac{\hbar q R_{ex}}{2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \right| B^{\frac{1}{2}} \quad (n_l = 0) \quad (4.73)$$

para o regime de campos magnéticos intensos. O módulo nas duas equações apenas assegura que o valor da energia de ligação excitônica será subtraído do restante das energia.

Nas duas equações fica bem clara a dependência dos níveis de energia com o campo magnético; no regime de campos de baixa intensidade os níveis são proporcionais a B^2 , enquanto no regime de altos campos existe uma dependência linear com B , referente aos níveis de Landau para cada um dos portadores, e uma dependência do tipo $B^{\frac{1}{2}}$, que está associada à variação que a energia de ligação excitônica apresenta com o campo magnético.

As equações acima estão relacionadas às transições energéticas de mais baixa energia, ou seja, transições decorrentes do nível fundamental do éxciton. Essas equações serão utilizadas na determinação experimental da energia de ligação excitônica e da dimensionalidade efetiva do sistema (capítulo 9).

CAPÍTULO 5 – POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS

O progresso nas técnicas de crescimento de heteroestruturas semicondutoras nas últimas décadas tem permitido o estudo de éxcitons de Wannier-Mott em sistemas de baixa dimensionalidade como, por exemplo, os *poços quânticos simples e duplos*. A idéia principal por trás do desenvolvimento de heteroestruturas foi desenvolver, artificialmente, poços de potenciais e barreiras de potenciais para portadores de carga, combinando diferentes materiais semicondutores. A forma destes potenciais nas bandas de valência (para buracos) e condução (para elétrons) é determinada, nas heteroestruturas, pela posição dos correspondentes limites das bandas nos materiais utilizados, bem como pela geometria da heteroestrutura. Dessa forma, a *engenharia de bandas* em heteroestruturas semicondutoras, por meio de técnicas de crescimento de alta precisão como, por exemplo, a técnica de *epitaxia por feixe molecular*, permite que se crie um grande número de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, para as mais diversas aplicações.

Este capítulo tem como propósito discutir os efeitos que os poços quânticos simples e duplos geram, através de mecanismos de confinamento, sobre os portadores de carga e, por conseguinte, sobre o éxciton e suas propriedades, tais como a energia de ligação e o raio excitônico. Será feita uma revisão sobre o cálculo dos níveis de energia dos portadores em poços quânticos simples e duplos e uma discussão mais profunda sobre a dimensionalidade e os efeitos desta sobre as propriedades excitônicas em poços quânticos simples e duplos. Além disso, será feita uma discussão sobre os efeitos da aplicação de um campo magnético, orientado ao longo da direção de crescimento, z , sobre os portadores de carga e sobre os éxciton nesses poços.

5.1 POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES

Um poço quântico simples (PQS) é um sistema composto por materiais semicondutores de "gaps" diferentes, sendo que o material de menor "gap" é intercalado entre dois materiais de "gap" maior. Pode-se, por exemplo, preparar um poço quântico crescendo-se uma camada de $GaAs$ entre duas camadas de $Al_xGa_{1-x}As$, em que o subscrito x determina a

concentração de alumínio na liga ternária, sendo que, quanto maior a concentração de alumínio nesta liga, maior será sua energia de "gap". Como o ternário $Al_xGa_{1-x}As$ possui uma energia de "gap" (E_G^{AlGaAs}) maior que a do binário $GaAs$ (E_G^{GaAs}), cria-se na heteroestrutura uma região unidimensional de confinamento de portadores (elétrons e buracos). 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 $Al_xGa_{1-x}As$ define a região das barreiras de potencial (Fig.5.1).

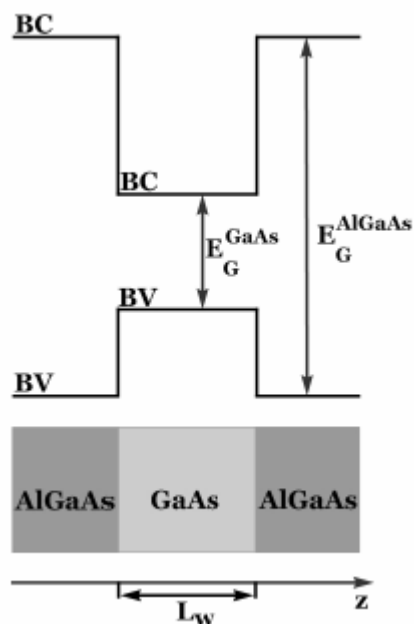


Figura 5.1 – A estrutura física e o perfil de potencial do poço quântico simples, que tem a forma de um poço retangular ao longo da direção de crescimento, z , da heteroestrutura.

A profundidade dos poços de potencial para os portadores, que são denominadas "offset" das bandas de valência (ΔE_V) e de condução (ΔE_C), são definidas a partir da descontinuidade do "bandgap", ΔE , entre os dois materiais, definida por:

$$\Delta E = E_G^{Al_xGa_{1-x}As} - E_G^{GaAs} \quad (5.1)$$

Porém, essa diferença de energia não se distribui com a mesma proporção entre os "offsets" da BC e da BV, sendo que a porcentagem maior desta diferença fica para o "offset" da BC (no caso do sistema $GaAs/AlGaAs$). Fisicamente, isso representa uma profundidade maior do poço de potencial para elétrons do que para o de buracos, que é determinada pelo "offset" da

BV. Seguindo o trabalho de Zhao e colaboradores [26], a descrição da variação de energia, ΔE , em função da concentração de alumínio x é dada por:

$$\Delta E = 1.455x \quad (5.2)$$

em que x é a concentração de alumínio. Os “offsets” da BC e da BV são dados, respectivamente, por [26]:

$$\Delta E_C = 0.65\Delta E \quad (5.3)$$

e

$$\Delta E_V = 0.35\Delta E \quad (5.4)$$

A Figura 5.2 mostra o esquema do potencial do poço quântico simples ao longo de z . O per_1 de potencial gerado pelo sistema restringe o movimento dos portadores ao longo desta direção de forma que estes possuem movimento livre apenas 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 (Fig. 5.2).

Os níveis de energia assumidos pelos portadores no poço quântico são totalmente distintos daqueles que estes possuíam nos materiais “bulk” $GaAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$. Além disso, a energia destes níveis no poço quântico dependerá tanto da concentração x de alumínio na liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$ quanto da largura L_w do poço quântico, determinada pela espessura do $GaAs$. Assim, para um dado par de parâmetros x e L_w , os níveis de energia gerados serão característicos e exclusivos deste poço quântico. A energia dos níveis permitidos para os portadores, bem como a energia que separa estes níveis, pode aumentar por meio de dois mecanismos: redução da largura L_w do poço quântico ou pelo aumento do potencial de confinamento, determinado pela concentração de alumínio, x , na liga ternária. Quanto maior a concentração de alumínio no $Al_xGa_{1-x}As$, maior será o potencial

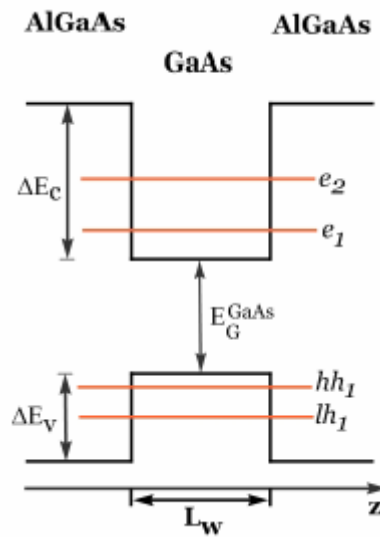


Figura 5.2 – Esquema do potencial de confinamento de portadores ao longo a direção de crescimento.

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.

de confinamento. Já quanto à largura do poço quântico, L_w , pode-se fazer uma análise tomando-se os dois limites do poço quântico, quando $L_w \rightarrow \infty$ e $L_w \rightarrow 0$. Um poço muito largo ($L_w \rightarrow \infty$) fará com que os níveis de energia se aproximem um dos outros e do fundo da BC do material do poço (no caso o *GaAs*); porém, por mais largo que seja o poço quântico, sempre haverá, pelo menos, um estado ligado [48]. Em contrapartida, um poço muito estreito ($L_w \rightarrow 0$) fará com estes níveis se distanciarem mais entre si e se aproximem do topo do poço. Desse modo, quando $L_w = 0$ todos os níveis estarão fora do poço, e pertencerão à BC do "bulk" $Al_xGa_{1-x}As$. Os efeitos da quantização dos níveis de energia em poços quânticos começam a surgir para uma L_w inferior a $\approx 400\text{\AA}$ [48].

Quando há transições entre níveis de energia, ou seja, entre níveis de elétrons e de buracos, existe uma regra para estas transições ocorram, denominada *regra de seleção*. Por esta regra, só poderá haver transições entre elétrons e buracos se os estados em que estes portadores se encontram possuem mesmo número quântico principal p . 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. Em geral, tem-se que:

$$\Delta p = p_e - p_h = 0 \quad (5.5)$$

em que P_e é o número quântico principal referente aos estados de elétrons e P_h é o número quântico principal referente aos estados de buracos (pesado ou leve) (Fig. 5.3).

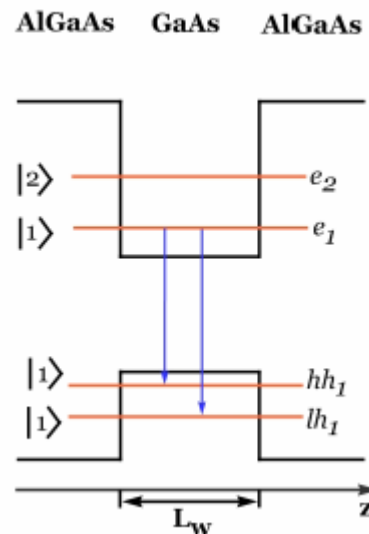


Figura 5.3 – Esquema da regra de seleção para as transições no poço quântico simples. Só poderão ocorrer transições entre estados com o mesmo número quântico p .

Outro ponto interessante a se analisar é a função de onda destes portadores. Pelo fato do poço quântico ser finito, a função de onda que descreve o estado dos portadores penetra nas barreiras de potencial, 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.

5.1.1 Níveis de Energia do Poço Quântico Simples

Em um poço quântico simples (Fig. 5.5), os portadores de carga ficam sujeitos à ação do potencial $V(z)$, dado por:

$$V(z) = \begin{cases} \Delta E_{e(v)} & \text{se } |z| > \frac{L_w}{2} \\ 0 & \text{se } |z| < \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.6)$$

Visto que este potencial não apresenta dependência temporal (é constante no 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 independente do tempo

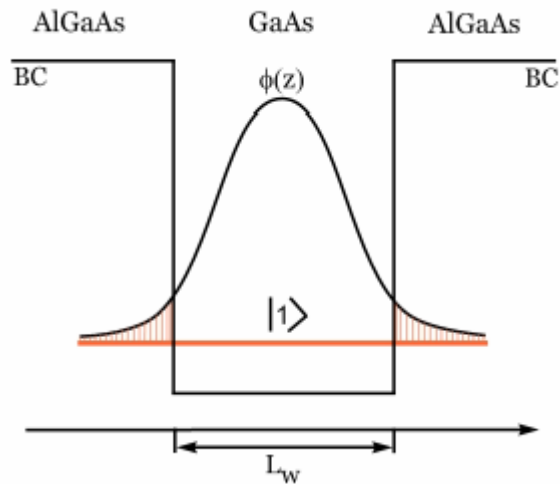


Figura 5.4 – Penetração da função de onda dos portadores na região das barreiras de potencial. A $\phi(z)$ é a função de onda para o estado $|p = 1 \rangle$, seja este estado de elétron ou buraco. A parte hachurada denota a penetração da função de onda nas barreiras de potencial.

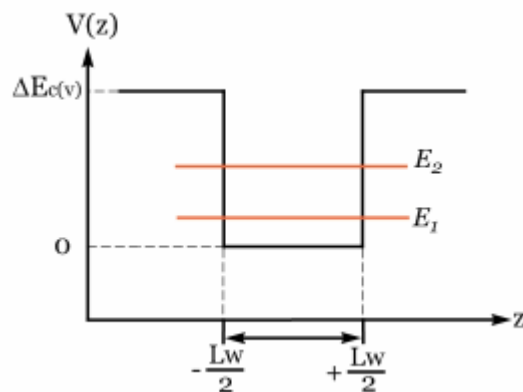


Figura 5.5 – Perfil de potencial ao longo da direção z do poço quântico. O potencial assume os seguintes valores: zero no fundo do poço e $\Delta E_{c(v)}$ nas barreiras; os índices c e v indicam, respectivamente, que o "offset" é em relação a banda de condução e valência. E_1 e E_2 são as energias assumidas pelos portadores no poço quântico, que possui uma largura L_w e tem suas interfaces definidas por $\pm L_w/2$

$$\hat{\mathcal{H}}\phi(z) = E_p\phi(z) \quad (5.7)$$

sendo $\hat{\mathcal{H}}$ o operador Hamiltoniano do sistema, dado por:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \hat{V}(z) = \frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}(z) \quad (5.8)$$

Substituindo (5.7) em (5.8), tem-se que:

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \hat{V}(z)\phi(z) = E_p\phi(z) \quad (5.9)$$

em que m^* é a massa efetiva, $V(z)$ é o potencial do poço, descrito pela condição (5.6), e E_p é a energia associada ao nível ocupado pelo portador. A Eq. (5.9) apresenta as seguintes soluções [1]:

$$\phi_w(z) = A \sin(k_w z + \varphi) \quad \text{para a região } |z| < \frac{L_w}{2} \quad (5.10)$$

e

$$\phi_b(z) = B \exp(\pm \kappa_b z) \quad \text{para a região } |z| > \frac{L_w}{2} \quad (5.11)$$

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

$$k_{we(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(h)}^* E_p} \quad (5.12)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (5.13)$$

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

Aplicando as condições de continuidade das funções de onda dadas pelas Eqs.(5.10) e (5.11) e de suas derivadas nas interfaces $(\pm \frac{L_w}{2})$, obtém-se a seguinte equação:

$$k_w L_w = p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{\frac{k_{w0}}{m_w^*}}{\sqrt{\left(\frac{k_{w0}}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \quad (5.14)$$

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 (Eq. 5.10). As funções de onda dos estados pares são descritas por funções do tipo *coseno* (Fig. 5.6a), enquanto que estados ímpares são descritos por funções do tipo *seno* (Fig. 5.6b). O termo que controla a forma da função de onda (Eq. 5.10) para o estado quântico é a fase ϕ . A Equação (5.14) 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. A metodologia do cálculo da energia dos níveis dos portadores, utilizando-se a Eq. (5.14), será discutida no capítulo 6.

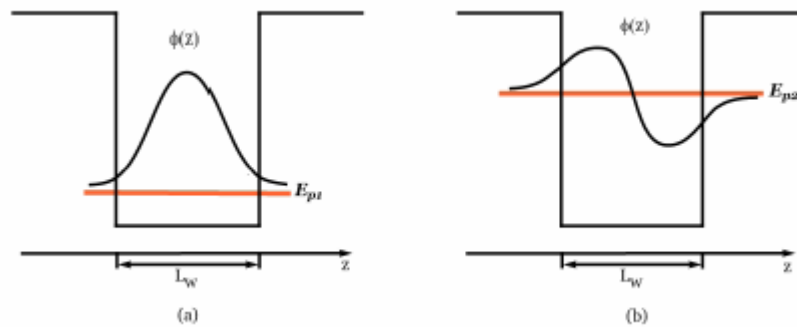


Figura 5.6 – Função de onda associada aos estados: (a) $|p=1\rangle$ e (b) $|p=2\rangle$.

5.2 POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS

Um poço quântico duplo (PQD) é uma heteroestrutura composta de dois poços quânticos simples separados por uma barreira estreita que, geralmente, é composta do mesmo material das barreiras laterais do poço. Assim, um poço quântico duplo de *AlGaAs/GaAs* pode ser preparado, por exemplo, crescendo-se uma camada de *AlGaAs*, uma camada uma camada de *GaAs*, uma camada de *AlGaAs*, uma camada de *GaAs* e uma camada de *AlGaAs* (Fig.5.7).

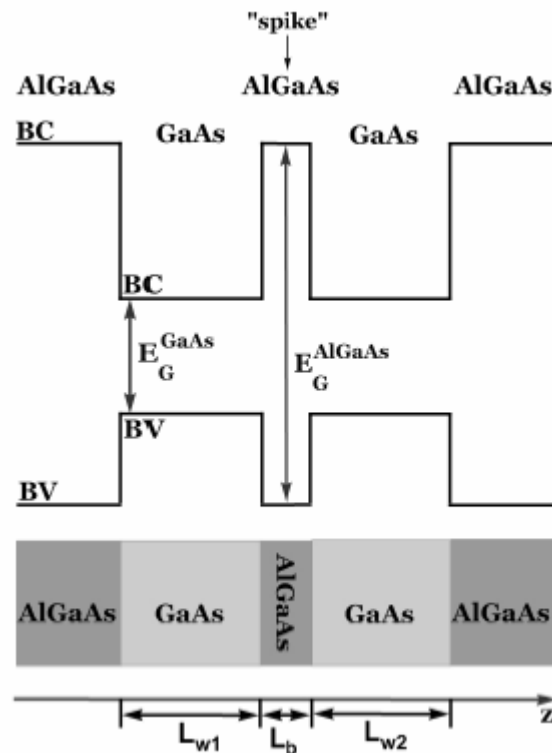


Figura 5.7 – Estrutura física e o perfil de potencial de um poço quântico duplo de *AlGaAs/GaAs*, com barreira central de *AlGaAs*. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços e L_b é a largura da barreira de separação entre os poços (barreira central).

Do mesmo modo que ocorre em sistemas de poços quânticos simples, o perfil de potencial gerado pelo sistema 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 . O diferencial nesta heteroestrutura (PQD), em relação aos poços quânticos simples, é a barreira de potencial central que separa os dois poços simples. Essa barreira torna-se um importante parâmetro na determinação do comportamento das propriedades dos portadores nesta heteroestrutura.

Uma propriedade fundamental dos poços quânticos duplos, e que está relacionada diretamente com a largura da barreira central, é o acoplamento que surge, devido ao efeito de tunelamento, entre as funções de onda dos poços quânticos individuais. Para um entendimento melhor deste efeito, considere um sistema de dois poços quânticos simples, de mesma largura, L_w , separados por uma barreira de largura L_b muito espessa ($L_b \rightarrow \infty$).

Nesta situação, o sistema comporta-se como dois poços quânticos simples e isolados (Fig. 5.8). O fato da barreira de separação entre eles ser suficientemente espessa faz com que as

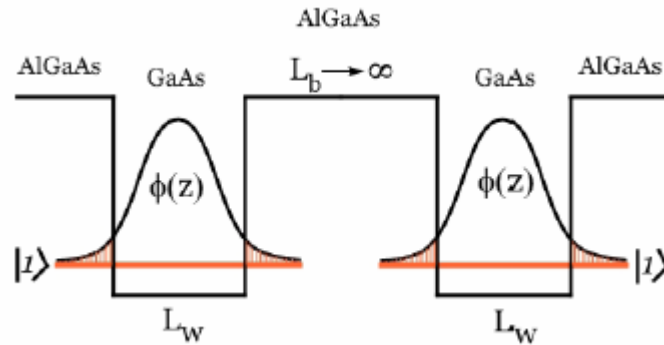


Figura 5.8 – Comportamento das funções de onda do poço quântico duplo a medida que $L_b \rightarrow \infty$. Como a barreira de separação, L_b é muito espessa, as funções de onda não sofrem "overlap", ou seja, um poço não perturba o outro. Desse modo, o sistema pode ser tratado como dois poços quânticos simples independentes.

funções de onda, mesmo penetrando na barreira de separação entre os poços, sejam não interagentes; portanto, os níveis de energia dos poços não sofrem perturbações, e continuam a ser descritos pela teoria de poços quânticos simples. À medida que a barreira central vai se estreitando, isto é, L_b diminui, as funções de onda dos dois poços começam se sobrepor, o que gera uma perturbação dos níveis de energia dos dois poços. A partir do momento em que as funções sofrem uma sobreposição ("overlap"), o sistema, que inicialmente se apresentava como dois poços quânticos simples e isolados, evolui para um sistema de poço quântico duplo acoplado, e os níveis de energia não podem mais ser descritos pela teoria de poços simples. Quando os poços se acoplam os níveis de energia de cada poço simples, que possuíam a mesma energia, se dividem ("split"), e o sistema passa a ter um nível com energia menor, denominado nível simétrico (E_S), e outro com energia maior, denominado nível anti-simétrico (E_A) [49] (Fig.5.9). A análise feita acima

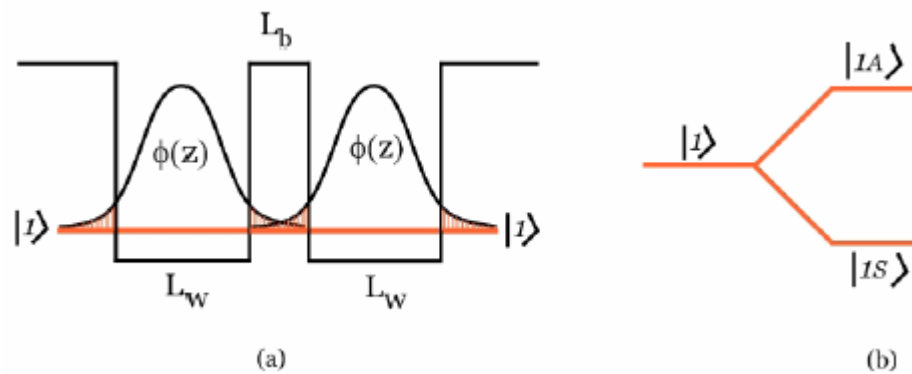


Figura 5.9 – (a) Largura da barreira central, L_b , suficientemente estreita para que haja interação das funções de onda dos poço quântico individuais; devido ao efeito de tune-lamento as funções de onda sofrem um "overlap". (b) Devido a este "overlap" o nível de energia $|p = 1 \rangle$ sofre um "splitting", gerando um nível 1 simétrico, $|p = 1s \rangle$, de menor energia, e um nível anti-simétrico, $|p=1A\rangle$, de maior energia.

foi apenas para o nível fundamental dos poços quânticos simples, mas o efeito do "splitting" de um mesmo nível de energia em dois outros, um simétrico e outro anti-simétrico, ocorre para todos os níveis de energia do poço quântico simples, quando este acopla-se com um segundo poço quântico simples.

Na situação em que $L_b = 0$ o sistema torna-se um poço quântico simples de largura $2L_w$. Supondo inicialmente que $L_{w1} = L_{w2} = L_w$, o nível simétrico evolui para o nível fundamental de um poço quântico simples com largura $2L_w$, enquanto que o nível anti-simétrico evolui para o segundo nível de energia do poço simples de largura $2L_w$ e, novamente, estes níveis passam a ser descritos pela teoria de poços quânticos simples (Fig. 5.10). Dessa forma, os poços quânticos duplos formam um sistema intermediário entre um poço quântico simples de largura L_w e um poço quântico simples de largura $2L_w$.

De maneira similar a que ocorre nos poços simples, as transições nos poços duplos devem obedecer à regra de seleção, porém, no caso do poço duplos, as transições permitidas

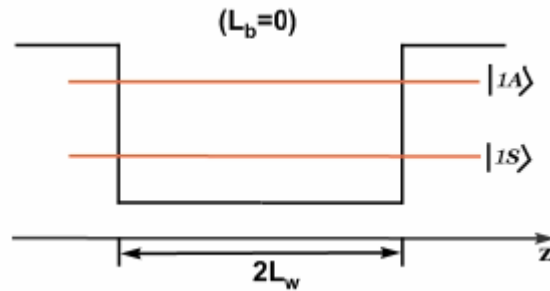


Figura 5.10 – Situação em que $L_b = 0$ e o poço quântico duplo evolui para um sistema de poço quântico simples de largura $2L_w$. Os níveis simétricos e anti-simétricos evoluem, respectivamente, para o primeiro e segundo níveis do poço de largura $2L_w$.

são de níveis simétricos de elétrons para níveis simétricos de buraco (pesado ou leve) e de níveis anti-simétricos de elétrons para níveis anti-simétricos para buracos (pesado ou leve). Só podem ocorrer transições 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). Porém, os estados ainda necessitam possuir o mesmo número quântico p (Fig. 5.11).

Os potenciais dos poços, para elétrons e buracos, continuam sendo dados, respectivamente, pelas relações (5.3) e (5.4). A estrutura energética do poço quântico duplo é mostrada na Fig. (5.11), bem como as transições permitidas.

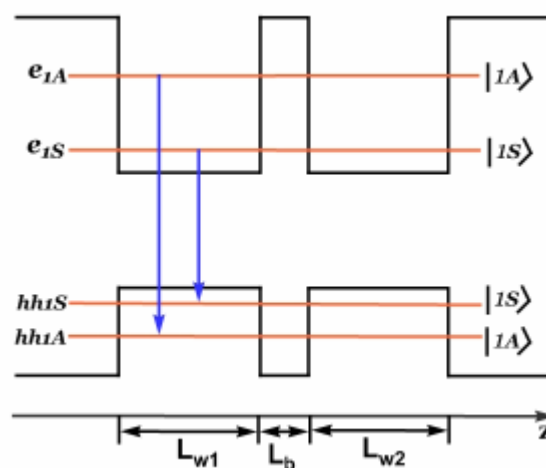


Figura 5.11 – Estrutura de bandas de energia do poço quântico duplo. L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços, L_b é a largura da barreira de separação, ΔE_c e ΔE_v são, respectivamente, os "offsets" da BC e da BV , e_{1S} e e_{1A} são, respectivamente, os níveis simétricos e anti-simétricos de elétrons, hh_{1S} e hh_{1A} são, respectivamente, os níveis simétricos e anti-simétricos de buraco pesado.

5.2.1 Níveis de Energia do Poço Quântico Duplo

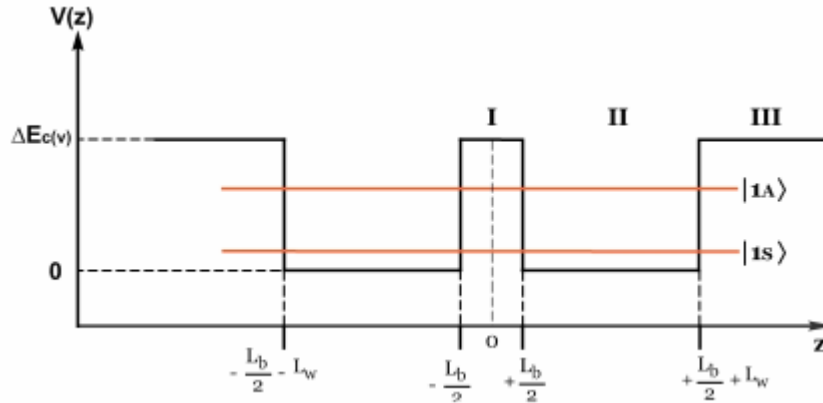


Figura 5.12 – Estrutura energética do poço quântico duplo ao longo da direção de crescimento, z .

Em um poço quântico duplo, que consiste de dois poços quânticos simples de largura L_w , separados por uma barreira de potencial de largura L_b (Fig. 5.12), os portadores ficam sujeitos à ação do potencial $V(z)$ dado por:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{L_b}{2} < |z| < \frac{L_b}{2} + L_w \\ \Delta E_{c(v)} & \text{demais regiões} \end{cases} \quad (5.15)$$

em que os índices e e h no potencial denotam o potencial para elétrons e buracos (pesado e leve), respectivamente. Na aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano do portador, ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura, z , é dado por:

$$\hat{\mathcal{H}}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + V(\hat{z}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \quad (5.16)$$

em que m^* é a massa efetiva do portador, sendo que na região do poço esta é designada por m_w^* e na região das barreiras é designada por m_b^* . A componente do operador posição e do operador momento são designados, respectivamente, por \hat{z} e \hat{p}_z . As soluções da equação de Schrödinger para as regiões descritas pelo potencial de confinamento são facilmente obtidas. A simetria do sistema fornece funções de onda com paridade par e ímpar; as funções de onda para as diferentes regiões da heteroestrutura são dadas por [42]:

$$\Phi(z) = \begin{cases} C_I [\exp(-\kappa_b z) + \exp(\kappa_b z)] & \text{paridade par} & \text{região I} \\ D_I [\exp(-\kappa_b z) - \exp(\kappa_b z)] & \text{paridade ímpar} & \text{região I} \\ C_{II} \cos[k_w(z-L)] + D_{II} \sin[k_w(z-L)] & & \text{região II} \\ C_{III} \exp(-\kappa_b z) & & \text{região III} \end{cases} \quad (5.17)$$

em que os C 's e os D 's são constantes a serem determinadas a partir de condições de contorno nas interfaces da heteroestrutura, k_w e κ_b são os vetores de onda na região dos poços e das barreiras, respectivamente, e são dados por [42]:

$$k_{we(b)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(h)}^* E} \quad (5.18)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_b^* (\Delta_{EC}(v) - E)} \quad (5.19)$$

Utilizando as condições de continuidade das funções de onda nas interfaces:

$$[\Phi_I(z)]_{+\frac{L_b}{2}} = [\Phi_{II}(z)]_{+\frac{L_b}{2}} \quad (5.20)$$

$$(5.21)$$

$$[\Phi_{II}(z)]_{+\frac{L_b}{2}+L_w} = [\Phi_{III}(z)]_{+\frac{L_b}{2}+L_w} \quad (5.22)$$

$$(5.23)$$

a continuidade das suas respectivas derivadas e do fluxo de partículas nas interfaces:

$$\left[\frac{1}{m_b^*} \frac{d\Phi_I(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}} = \left[\frac{1}{m_w^*} \frac{d\Phi_{II}(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}} \quad (5.24)$$

$$(5.25)$$

$$\left[\frac{1}{m_w^*} \frac{d\Phi_{II}(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}+L_w} = \left[\frac{1}{m_b^*} \frac{d\Phi_{III}(z)}{dz} \right]_{+\frac{L_b}{2}+L_w} \quad (5.26)$$

$$(5.27)$$

em que os índices I , II e III indicam as regiões da heteroestrutura e as respectivas funções de onda. A partir da aplicação destas condições, e após uma trabalhosa manipulação matemática, obtém-se as equações para os auto-estados de energia para o poço quântico duplo, dadas por:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \pm \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) = 0 \quad (5.28)$$

em que

$$\zeta = \frac{\kappa_b m_w^*}{k_w m_b^*} \quad (5.29)$$

Na Equação (5.28) o sinal positivo refere-se aos estados com paridade *ímpar*, e o sinal negativo refere-se aos estados com paridade *par*. Um desenvolvimento mais detalhado do cálculo dos níveis de energia para os portadores de carga será dado no capítulo 6.

5.3 ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS

O efeito de confinamento gerado pelos sistemas de poços quânticos simples e duplos 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 menor, estes ficam 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, visto que este potencial é inversamente proporcional à distância da interação:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e}{r} \quad (5.30)$$

em que $r = |r_e - r_h|$ 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. Esse ganho na energia de ligação permite que as transições excitônicas sejam observadas até temperaturas próximas da ambiente, o que não é possível no caso de materiais volumétricos (“bulk”). Isso ocorre porque, conforme se aumenta a temperatura do sistema, a rede cristalina começa a vibrar, e essas vibrações são responsáveis pela quebra da energia de ligação excitônica em materiais volumétricos (“bulk”). Como a energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos tem um ganho devido ao confinamento, são necessárias temperaturas maiores para que as vibrações da rede sejam suficientemente fortes para quebrar o éxciton.

A energia de ligação e o raio excitônico em poços quânticos não são tão simples de serem determinados, em relação à determinação destes parâmetros nos materiais

volumétricos (“bulk”). Sistemas de poços quânticos simples e duplos, diferentemente do material volumétrico (“bulk”) que é isotrópico, apresentam um certo grau de anisotropia. Essa anisotropia, que é gerada pelo confinamento dos portadores e do próprio éxciton ao longo da direção de crescimento, faz com que as interações destes portadores, e do éxciton, com o meio seja diferente ao longo das diferentes orientações do material. Para resolver o problema da anisotropia, He [30] propôs uma teoria, que é conhecida como teoria do espaço dimensional fracionário, e que foi discutida no capítulo 3. Neste modelo, as interações anisotrópicas em um espaço $3D$ são tratadas como isotrópicas em um espaço de dimensão fracionária, e a dimensão do sistema, α , é determinada pelo grau de anisotropia do sistema. Nesse espaço, o problema do éxciton em poços quânticos torna-se novamente o de um átomo de hidrogênio, porém não em um espaço inteiro, como $2D$ ou $3D$, mas em um espaço de dimensão fracionária α . Utilizando o modelo de He [30], conforme foi discutido no capítulo 3, a energia e o raio orbital para o estado $1S$ do éxciton são dados, respectivamente, por:

$$E_{1S} = - \left[\frac{2}{\alpha - 1} \right]^2 E_0^* \quad (5.31)$$

e

$$a_{1S} = - \left[\frac{\alpha - 1}{2} \right]^2 a_0^* \quad (5.32)$$

em que E_0^* e a_0^* são, respectivamente, o Rydberg efetivo, dado por (2.20), e o raio de Bohr efetivo, dado por (2.21).

Em poços quânticos reais, o valor de α varia entre 2 e 3. Essa diminuição da dimensionalidade pode ser explicada pelo seguinte mecanismo: conforme a largura do poço quântico diminui, confinando os portadores e, por conseguinte, o éxciton, em uma região menor do espaço, as funções de onda destes, que antes eram espalhadas por todo o material, ficam mais comprimidas e mais localizadas. A interação de Coulomb entre o par torna-se anisotrópica devido ao confinamento gerado pelo poço quântico e a dimensão do sistema, α , decresce de 3 para 2, conforme a largura do poço diminui. Para poços muito estreitos, as funções de onda penetram muito nas barreiras, restaurando em parte a tridimensionalidade do sistema, e o confinamento diminui, fazendo com que α volte a crescer conforme a largura do poço diminui. Ou seja, α nunca atingirá o valor 2 (sistema completamente bidimensional), mas apresentará um valor mínimo e, a partir deste valor, 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 regiões perfeitamente bidimensionais de confinamento.

Dessa forma, o problema principal consiste em definir a dimensão fracionária α , que descreve o grau de anisotropia da interação elétron-buraco.

5.3.1 Dimensionalidade em Poços Quântico Simples

Este problema foi solucionado por Mathieu et al. [1], que desenvolveram uma expressão analítica para o cálculo da dimensionalidade α . Segundo os autores, este parâmetro deve estar relacionado com a extensão espacial da interação entre o par elétron-buraco. Então, a dimensão fracionária α , pode ser relacionada por uma expressão do tipo [1]:

$$\alpha = 3 - \exp(-\beta) \quad (5.33)$$

em que $\beta \rightarrow \infty$ 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[1]:

$$\beta = \frac{L_w^*}{2a_0^*} \Rightarrow \alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_w^*}{2a_0^*}\right) \quad (5.34)$$

em que a_0^* representa o raio do éxciton na heteroestrutura e L_w^* é a largura efetiva do poço quântico, e representa a extensão espacial do movimento dos portadores ao longo da direção de confinamento, z , e é dado por [1]:

$$L_w^* = \frac{1}{K_b} + L_w + \frac{1}{K_b} = \frac{2}{k_{be(h)}} \quad (5.35)$$

$$(5.35)$$

em que K_b é dado por [1]:

$$\frac{1}{K_b} = \frac{1}{\kappa_{be}} + \frac{1}{\kappa_{bh}} \quad (5.36)$$

onde k_{be} e κ_{bh} são os vetores de onda dos portadores na região das barreiras e são dados pela Eq. (5.13). A extensão espacial dos portadores, dada pela Eq. (5.35), leva em conta a extensão espacial do poço quântico mais a extensão espacial da penetração da função de onda em ambas as barreiras de potencial, sendo esta penetração representada pelo termo $1/k_{be(h)}$.

No trabalho de Mathieu et al., além de apresentarem uma expressão para o cálculo da dimensionalidade α , eles apresentam certas correções que são importantes para a obtenção de resultados realísticos das Eqs. (5.31) e (5.32). Essas correções são devidas à descontinuidade da massa efetiva dos portadores e da constante dielétrica nas interfaces do poço e também à não parabolicidade da banda de condução. Todas essas correções estão implicitamente embutidas no parâmetro α_0^* , mas essas correções serão abordadas com mais detalhes no capítulo 6.

5.3.2 Dimensionalidade em Poços Quânticos Duplos

Quando o modelo de Mathieu et al. [1] é estendido para um sistema de poço quânticos duplos, um aspecto importante a se levar em conta é como definir o parâmetro dimensional α . Se for possível considerar um sistema de dois poços acoplados como um sistema de um poço simples de largura efetiva $L_{w,eff}$, a expressão analítica (5.33) pode ser diretamente aplicada no cálculo do parâmetro α , pela simples substituição de L_w por $L_{w,eff}$ na Eq.(5.35).

Analisando, novamente, os limites do sistema de poços quântico duplos acoplados, tem-se que:

$$L_b \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad L_{w,eff} \rightarrow L_{w1} + L_{w2}$$

$$L_b \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad L_{w,eff} \rightarrow L_{w1} \text{ ou } L_{w,eff} \rightarrow L_{w2}$$

(5.37)

No primeiro caso, em que a largura da barreira tende para zero, o sistema evoluirá para um poço quântico simples, com largura efetiva dada pela soma das larguras individuais de cada poço do sistema de poços duplos. 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 poços simples, e a largura efetiva será ou a largura do primeiro poço, ou a largura do segundo poço, visto que os poços são não-interagentes.

Baseando-se nos casos limites, e supondo que $L_{w1} > L_{w2}$, Zhao et al. [26] propuseram a seguinte expressão para a largura efetiva do poço quântico duplo:

$$L_{w.eff} = L_{w1} + L_{w2} \exp(-L_b K_b) \quad (5.38)$$

em que L_b é a espessura da barreira de separação entre os poços, e o parâmetro K_b representa o vetor característico da penetração do éxciton na barreira central, e é responsável por caracterizar a interação entre os dois poços, sendo por [26]:

$$\frac{1}{K_b} = \frac{1}{\kappa_{be}} + \frac{1}{\kappa_{bh}} \quad (5.39)$$

em que, para o poço quântico duplo, os parâmetros κ_{be} e κ_{bh} são os vetores de onda do elétron e do buraco na região da barreira central, respectivamente, e são obtidos a partir da Eq. (5.19). Então, para obter-se α para o sistema de poços quânticos duplos, basta substituir L_w por $L_{w.eff}$ na Eq. (5.35).

CAPÍTULO 6 – MÉTODO ANALÍTICO PARA O CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO DE ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS

Neste capítulo é apresentada a metodologia utilizada no cálculo dos níveis de energia em poço quânticos simples e duplos e, posteriormente, é apresentada a metodologia para o cálculo da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos pelo método MLC [1, 26].

O método MLC, além de ser analítico e livre de qualquer parâmetro de ajuste, fornece a possibilidade de se fazer correções devido à não parabolicidade da banda de condução e devido à diferença entre os parâmetros dos materiais do poço e das barreiras. O método utiliza o modelo de espaço de dimensão fracionária, já empregado no estudo de éxcitons de Wannier-Mott em sólidos anisotrópicos [30]. O éxciton em um sólido anisotrópico como, por exemplo, um poço quântico, é tratado como se estivesse num espaço isotrópico de dimensão fracionária α , em que a dimensão é determinada pelo grau de anisotropia, ou seja, fornece o grau de anisotropia do sistema. Conhecendo-se a dimensão α do sistema, o modelo possibilita o estudo da energia de ligação excitônica desde sistemas tridimensionais $\alpha = 3$, até sistemas unidimensionais ($\alpha = 1$), sendo que α varia continuamente dentro do intervalo $1 < \alpha < 3$.

6.1 CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES

Na Figura 6.1 tem-se um esquema do perfil de potencial para um PQS ao longo da direção de crescimento. E_p é a energia de confinamento do portador (elétron ou buraco), L_w é a largura do PQS e $\Delta E_{c(v)}$ é a profundidade (em energia) do poço, dada pelas Eqs. (5.3) e (5.4).

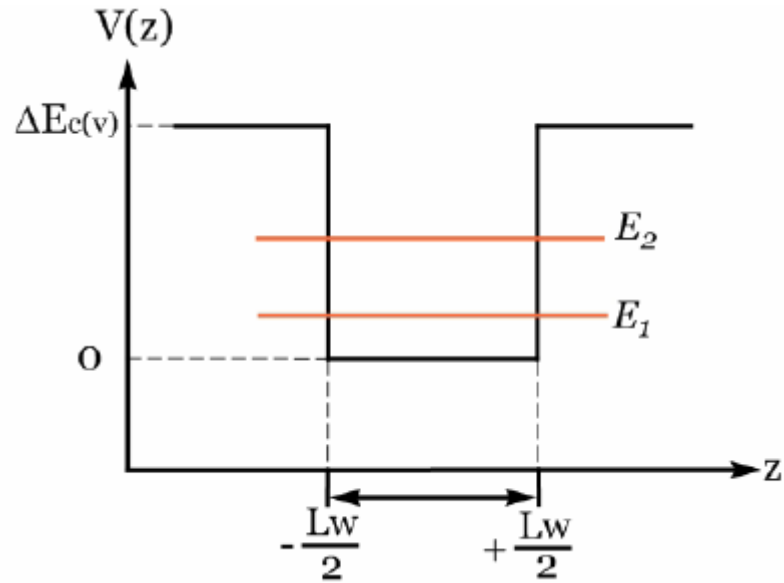


Figura 6.1 – Perfil de potencial de um PQS ao longo da direção de crescimento, z .

A partir da solução da equação de Schrödinger em uma dimensão:

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \Delta E_{c(v)}(z)\phi(z) = E_p\phi(z), \quad (6.1)$$

em que m^* é a massa efetiva do portador e $\phi(z)$ é a função envelope do portador ao longo da direção z , obtém-se uma equação transcendental, a partir da qual pode-se calcular os níveis de energia E_p . Essa equação transcendental é dada por [1]:

$$k_w L_w = p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{\frac{k_w}{m_w^*}}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \quad (6.2)$$

em que p é o número quântico principal, k_w e κ_b são os vetores de onda no interior do poço e na região das barreiras, respectivamente, e são definidos como:

$$k_w = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_w^* E_p} \quad (6.3)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (6.4)$$

em que m_w^* e m_b^* são as massa efetivas dos portadores nas regiões do poço e das barreiras de potencial, respectivamente, $\Delta E_{c(v)}$ é o potencial do poço (em que os subscritos c e v representam o potencial do poço para elétrons e para buracos, respectivamente) e E_p é a energia do estado ocupado pelo portador no poço quântico. A Equação (6.2) 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.

Antes de proceder com o cálculo dos níveis de energia é necessário fazer uma transformação quanto às unidades dos vetores de onda (6.3) e (6.4). Como a massa é dada em *quilogramas* (Kg) e a energia é dada em *elétron-volts* (eV), ou seja, essas grandezas estão em sistemas de unidades diferentes, é necessário 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:

$$2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \quad (6.5)$$

Portanto, os vetores de onda podem ser expressos como:

$$k_w(m^{-1}) = 2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_w^*(Kg)E_p(eV)}}{\hbar(eV \times s)} \quad (6.6)$$

e

$$\kappa_b(m^{-1}) = 2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_b^*(Kg)(\Delta E_{c(v)} - E_p)(eV)}}{\hbar(eV \times s)} \quad (6.7)$$

As unidades entre parênteses são aquelas em que os parâmetros devem estar. Com essa unidades, as energias E_p serão dadas em elétron-volts.

Pode-se notar que os vetores de onda estão expressos em função da energia E_p . Conseqüentemente, para se calcular os níveis de energia E_p , deve-se substituir as Eqs. (6.6) e (6.7) na Eq. (6.2) e, então, graficar-se, em um mesmo ambiente gráfico, as seguintes expressões:

$$k_w L_w \times E_p \quad (6.8)$$

e

$$p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{\frac{k_w}{m_w^*}}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{k_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] x E_p \quad (6.9)$$

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

6.2 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES PELO MÉTODO MLC

Como visto no capítulo 3, a energia de ligação de um éxciton em um sólido anisotrópico pode ser dada pela seguinte expressão:

$$E_b = \frac{E_0}{\left[n + \frac{\alpha - 3}{2} \right]^2} \quad (6.10)$$

em que $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal, E_0 é o Rydberg efetivo, dado pela Eq. (2.20), e α é o parâmetro que mede a dimensionalidade ou grau de anisotropia do sistema.

Para que seja possível utilizar a Eq.(6.10), é necessário saber o valor da dimensão α do sistema. Uma expressão para o cálculo de α em poços quânticos simples foi proposta por Mathieu et al. [1]:

$$\alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_w^*}{2a_0^*}\right) \quad (6.11)$$

Além da expressão para o cálculo do parâmetro α , eles propuseram um modelo, que na literatura é conhecido como modelo MLC, para o cálculo da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples, que não se restringe apenas à determinação do parâmetro α mas também introduz uma série de correções, tais como a não parabolicidade da BC, a diferença entre os parâmetros do material do poço e das barreiras e o efeito das cargas

imagem sobre a energia de ligação excitônica. A seguir, será apresentada uma descrição do modelo *MLC* e das correções propostas por este modelo.

6.2.1 Cálculo do Vetor de Onda Característico (K_b) e da Largura Efetiva do Poço Quântico Simples (L_w^*)

Após o cálculo dos níveis de energia dos portadores no PQS, é possível, a partir da Eq. (6.7), calcular os vetores de onda dos portadores na região das barreiras de potencial. As funções envelope, $\phi(z)$, do elétron e do buraco, que penetram nas barreiras de potencial, se combinam para formar a função envelope do éxciton. A partir da penetração da função envelope do éxciton nas barreiras de potencial, defini-se uma extensão espacial do éxciton ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura (z). Essa extensão espacial será dada por um vetor de onda característico, K_b , que quantificará a penetração da função envelope do éxciton nas barreiras de potencial. O vetor característico da função envelope do éxciton, K_b , pode ser expresso como uma combinação dos vetores de onda do elétron e do buraco na região das barreiras, através da seguinte relação [1]:

$$\frac{1}{K_b} = \frac{1}{\kappa_{be}} + \frac{1}{\kappa_{bh}} \quad (6.12)$$

em que κ_{be} e κ_{bh} são os vetores de onda do elétron e do buraco na região das barreiras, respectivamente, e são dados pela Eq. (6.7).

A partir do cálculo do vetor de onda característico K_b , define-se o parâmetro L_w^* como sendo a largura efetiva do poço quântico simples ao longo da direção de crescimento, z , e dado por [1]:

$$L_w^* = \frac{1}{K_b} + L_w + \frac{1}{K_b} = \frac{2}{K_b} + L_w \quad (6.13)$$

A Figura (6.2) mostra um esquema da largura efetiva de um poço quântico simples. Pela Equação (6.12) a largura efetiva de um poço quântico simples é dada pela largura física do poço mais a quantidade que a função de onda do éxciton penetra nas barreiras de potencial. Essa largura define a faixa de interação do éxciton ao longo da direção z .

6.2.2 Descasamento da Massa Efetiva dos Portadores entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico

Sobre o comprimento característico da interação de Coulomb entre o par elétron-buraco, é importante notar que o raio de Bohr efetivo a_0 (Eq. (2.21)) varia, visto que a massa efetiva e a constante dielétrica variam entre os materiais do poço e das barreiras. Para levar em conta esses fatores de descasamento entre os parâmetros dos materiais

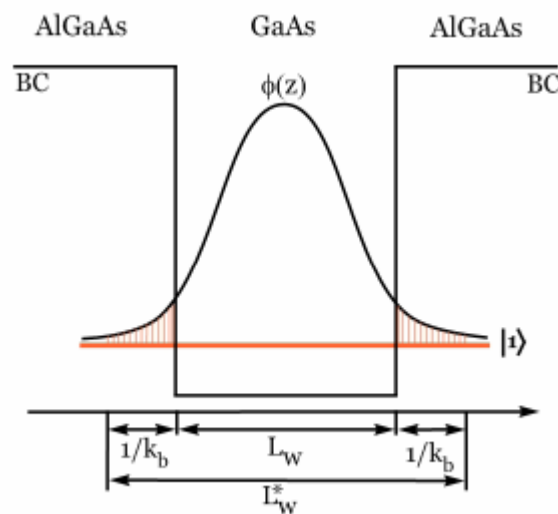


Figura 6.2 – Esquema da largura efetiva L_w^* em um poço quântico simples.

do poço e das barreiras, define-se dois parâmetros, β_e e β_h , que funcionam como pesos estatísticos [1]:

$$\beta_e = \frac{L_w}{\frac{2}{K_{be}} + L_w} \quad (6.14)$$

e

$$\beta_h = \frac{L_w}{\frac{2}{K_{bh}} + L_w} \quad (6.15)$$

em que os subscritos e e h indicam o elétron e o buraco, respectivamente. Esses pesos funcionam da seguinte maneira: divide-se a extensão espacial do portador (elétron ou buraco)

no poço quântico, dado pela largura física do poço, L_w , 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 a constante dielétrica.

Utilizando esses pesos, os valores médios da massa efetiva do elétron e dos parâmetros da banda de valência podem ser reescritos como [1]:

$$m_e^* = \beta_e m_{we} + (1 - \beta_e) m_{be} \quad (6.16)$$

$$\gamma_1^* = \beta_h \gamma_{w1} + (1 - \beta_h) \gamma_{b1} \quad (6.17)$$

$$\gamma_2^* = \beta_h \gamma_{w2} + (1 - \beta_h) \gamma_{b2} \quad (6.18)$$

em que γ_1 e γ_2 são os parâmetros de Luttinger, dados por [41]

$$\gamma_{1w(b)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{hhw(b)}^*} + \frac{1}{m_{ihw(b)}^*} \right) m_0 \quad (6.19)$$

e

$$\gamma_{2w(b)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{ihw(b)}^*} + \gamma_{1w(b)} \right) m_0 \quad (6.20)$$

em que os subscritos “w” e “b”, representam a região do poço e das barreiras, respectivamente. Então, o valor médio do raio de Bohr, a_0^* , que é o comprimento característico da interação de Coulomb pode ser reescrito como:

$$a_0^* = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \frac{m_0}{\mu^*} a_H \quad (6.21)$$

em que μ^* é o valor médio da massa reduzida do éxciton, dado por [1]

$$\frac{1}{\mu^*} \simeq \frac{1}{m_e^*} + \gamma_1^* \quad (6.22)$$

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

6.2.3 Correção Devido ao Efeito de não Parabolicidade da BC

Em poços quânticos estreitos, os níveis de energia são da ordem de centenas de $meVs$ superiores, com relação ao fundo da BC dos materiais volumétricos ("bulk") e espera-se que as correções dos efeitos de não parabolicidade da banda de condução, mostrados na Fig 6.3 sejam importantes.

Uma maneira conveniente de incluir esses efeitos no modelo *MLC* é expressar a massa efetiva dos elétrons em termos da energia do nível (E_p). Ekemberg [43] mostrou que o mínimo da curvatura da relação de dispersão da sub-banda no plano não corresponde à mesma massa efetiva dos materiais volumétricos ("bulk"). Além disso, a anisotropia da banda de condução possui maiores efeitos em poços quânticos do que em materiais volumétricos ("bulk"). Relativamente à massa em materiais volumétricos, o aumento da massa no plano ($m_{||}$), que é relevante para o cálculo da energia de ligação excitônica, E_b , é três vezes maior que a massa ao longo da direção z (m_z), que é relevante para o cálculo das energias de confinamento dos portadores. Para poços quânticos finitos e infinitos, Ekemberg mostrou que a dependência das massas efetivas m_z e $m_{||}$ com a energia de confinamento pode ser escrita da seguinte forma:

$$m_z \cong m_e(1 + \alpha' E_p) \quad (6.23)$$

e

$$m_{||} \cong m_e[1 + (2\alpha' + \beta' E_p)] \quad (6.24)$$

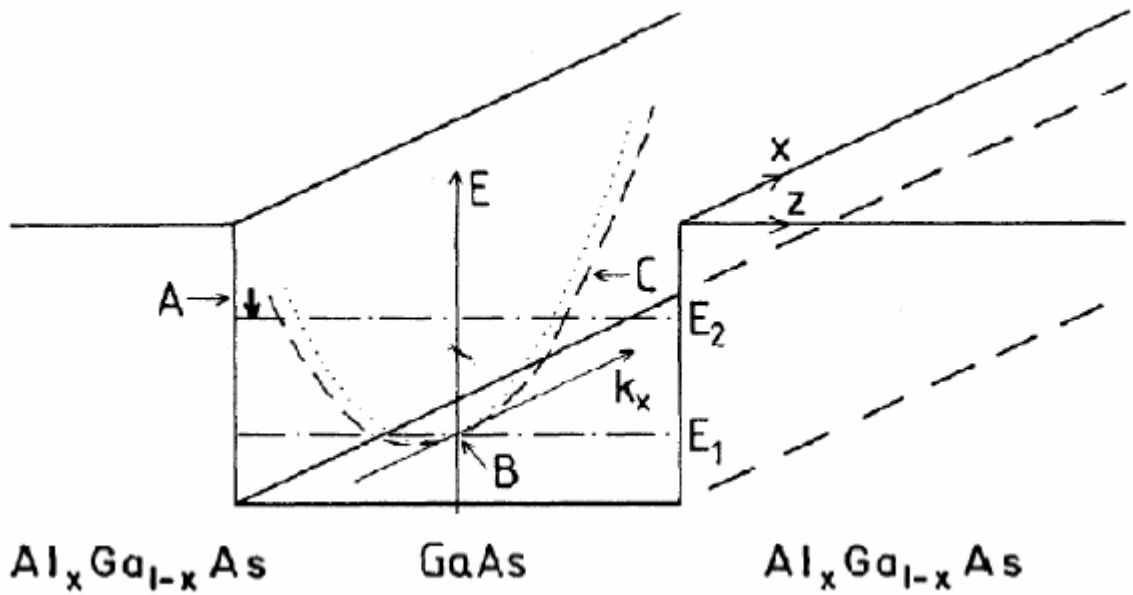


Figura 6.3 – Esquema dos efeitos da não paraboloidade da banda em poço quânticos simples. Esses efeitos são: (A) o deslocamento dos níveis de energia, com relação ao mesmo em uma banda perfeitamente parabólica, (B) a região de mínimo da curvatura de dispersão que corresponde à massa paralela (massa no plano perpendicular à direção de z) é diferente da massa paralela dos portadores em materiais volumétricos ("bulk"), (C) A dispersão das sub-bandas (curva tracejada) sofre um desvio da curva parabólica (curva pontilhada).

em que α' e β' são dados por:

$$\alpha' = - \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^2 \alpha_0 \quad (6.25)$$

e

$$\beta' = - \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^2 \beta_0 \quad (6.26)$$

em que m_e é a massa efetiva do elétron no "bulk" e E_p é a energia de confinamento do elétron. Os parâmetros α_0 e β_0 , que são negativos, são obtidos a partir do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de cálculo [44]. A Equação (6.23) pode ser usada para calcular a massa efetiva do elétron na região do poço (m_{we}) e das barreiras (m_{be}), que aparece na Eq. (6.16), da seguinte forma:

$$m_{we} \simeq m_{we0} [1 + (2\alpha' + \beta')E_p] \quad (6.27)$$

e

$$m_{be} \simeq m_{be0} [1 + (2\alpha' + \beta')(\Delta E_c - E_p)] \quad (6.28)$$

em que m_{we0} e m_{be0} são as massas efetivas na região do poço e das barreiras, respectivamente. ΔE_c é o potencial de confinamento para elétrons e E_p é a energia de confinamento destes no poço quântico. Para o $GaAs$, $\alpha' = 0.64 \text{ eV}^{-1}$ e $\beta' = 0.70 \text{ eV}^{-1}$; neste trabalho, estes parâmetros serão utilizados também para o material da barreira ($Al_{0.25}Ga_{0.75}As$).

6.2.4 Descasamento da Constante Dielétrica entre os Materiais da Barreira e do Poço Quântico

Considerando agora os efeitos do descasamento da constante dielétrica entre os materiais 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 do éxciton que penetra nas barreiras de potencial. Como, geralmente, a constante dielétrica do material da barreira é menor do que a do material do poço quântico, o resultado é um aumento na energia de ligação excitônica, como discutido no capítulo 2. O segundo está relacionado com a força e a posição das cargas imagem na heteroestrutura, visto que pode haver quatro configurações possíveis para a localização do elétron e do buraco que compõem o éxciton: elétron na barreira e buraco no poço, elétron no poço e buraco no poço, elétron no poço e buraco na barreira e elétron e buraco na barreira. Esses efeitos podem ser incluídos no modelo *MLC* de uma forma analítica. O primeiro deles 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:

$$\varepsilon^* = \sqrt{\beta_e \beta_h} \varepsilon_w + (1 - \sqrt{\beta_e \beta_h}) \varepsilon_b \quad (6.29)$$

em que 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, definidos por (6.13) e (6.14), respectivamente.

O efeito das cargas imagem, que é puramente eletrostático, é mais complicado de se estudar, pois há infinitas séries de cargas imagem associadas com o movimento do par elétron-buraco. Além disso, em poços quânticos finitos há quatro diferentes configurações correspondentes ao par elétron-buraco dentro do poço ou do material

das barreiras. Tratando o problema via teoria de perturbação, Andreani e Pasquarello [45] obtiveram a seguinte expressão para o acréscimo na energia de ligação excitônica:

$$\Delta E = 2 \left(\frac{\varepsilon_w - \varepsilon_b}{\varepsilon_w + \varepsilon_b} \right) \left(\frac{q^2}{\varepsilon_w a_0} \right) \frac{I(L_w/a_0)}{L_w/a_0} \quad (6.30)$$

em que q é a carga fundamental, L_w é a largura do poço quântico, e $I(L_w/a_0)$ é dada por:

$$I(L_w/a_0) = \int_0^\infty \frac{(2L_w/a_0)^3}{[x^2 + (2L_w/a_0)^2]^{\frac{3}{2}}} \frac{e^{-x}}{[1 + (x/2\pi)^2]^2} \left(\frac{\sinh(x/2)}{x/2} \right)^2 dx \quad (6.31)$$

A quantidade adimensional $I(L_w/a_0)L_w/a_0$ pode ser estimada com boa precisão por uma expressão analítica. Substituindo a_0 por a_0^* , o acréscimo ΔE na energia de ligação excitônica, para poços quânticos finitos, pode ser reescrito como [1]:

$$\Delta E \cong 2 \frac{\varepsilon_w - \varepsilon_b}{\varepsilon_w + \varepsilon_b} \frac{q^2}{\varepsilon_w L_w} \left[1 - \exp\left(-\frac{1.7L_w}{a_0^*}\right) \right] \quad (6.32)$$

ΔE , que é proporcional ao descasamento da constante dielétrica, aumenta conforme a largura do poço quântico diminui.

6.2.5 Dependência da Massa Efetiva com a Dimensionalidade α

Em semicondutores volumétricos (“bulk”) do tipo “zinc-blend”, o topo da banda de valência é degenerada, e E_0^* pode ser obtido utilizando a seguinte expressão para a massa dos buracos (pesado e leve) [1]:

$$m_h = \frac{1}{\gamma_1} \quad (6.33)$$

O parâmetro γ_2 , que descreve os efeitos de anisotropia, produz pequenas correções, que são tratadas por teoria de perturbação de segunda ordem [46]. Entretanto, em sistemas bidimensionais a anisotropia é muito forte, e as sub-bandas de buraco pesado e leve

são separadas. As massas no plano para buracos pesado e leve são dadas, respectivamente, por:

$$\frac{1}{m_{hh}} = \gamma_1 + \gamma_2 \quad (6.34)$$

e

$$\frac{1}{m_{lh}} = \gamma_1 - \gamma_2 \quad (6.35)$$

Essas massas são relevantes para descrição de um éxciton puramente bidimensional. Para incluir esse feito no modelo MLC, o método utilizado é o seguinte: considerando um sistema α -dimensional, pode-se utilizar uma interpolação entre os dois casos limites, isto é, o caso 3D e o 2D. Então, para se levar em conta a penetração das funções de onda na região das barreiras e a dependência da massa efetiva no plano com a dimensionalidade α , pode-se utilizar as seguintes relações para as massa efetivas [1]:

$$\frac{1}{m_{hh}^*} = \frac{1}{m_e^*} + \gamma_1^* + (3 - \alpha)\gamma_2^* \quad (6.36)$$

e

$$\frac{1}{m_{lh}^*} = \frac{1}{m_e^*} + \gamma_1^* - (3 - \alpha)\gamma_2^* \quad (6.37)$$

em que m_e^* , γ_1^* e γ_2^* são dadas, respectivamente, pelas Eqs. (6.16), (6.17) e (6.17). Essas massas podem ser utilizadas para o cálculo do Rydberg efetivo (2.20) e do raio de Bohr efetivo (2.21).

6.3 DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA (E_b)

A partir do obtenção do parâmetro a , a energia de ligação excitônica, E_b , pode ser expressa como:

$$E_b = \frac{4E_0^*}{[2n + \alpha - 3]^2} \quad (6.38)$$

em que $n = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal e E_0^* e a_0^* são os valores médios do Rydberg efetivo e do raio de Bohr efetivo para um éxciton $3D$, dados pelas Eq. (2.20) e (2.21), respectivamente, porém com todas as correções propostas por Mathieu et al.

A Equação (6.38) permite o cálculo da energia de ligação excitônica para diferentes pares de estados confinados de elétron-buraco ($e_p - h_p$). Além disso, é possível o cálculo da energia de ligação de estados excitados do éxciton ($n > 1$).

6.4 CÁLCULO DOS NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS SIMÉTRICOS

Na Figura 6.4 tem-se um esquema do perfil de potencial para um PQDS ao longo da direção de crescimento. Na figura, E_{ps} é a energia de confinamento do portador (elétron ou buraco) (o subscrito "S" indica que o estado é simétrico, enquanto que o subscrito "A" indica que o estado é anti-simétrico), L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços individuais (como os poços são simétricos, $L_{w1} = L_{w2} = L_w$) e $\Delta E_{c(v)}$ é a profundidade (em energia) dos poços, dada pelas Eqs. (5.3) e (5.4).

A partir da solução da equação de Schrödinger em uma dimensão

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{d^2\phi(z)}{dz^2} + \Delta E_{c(v)}(z)\phi(z) = E_p\phi(z) \quad (6.39)$$

em que m^* é a massa efetiva do portador e $\phi(z)$ é a função envelope do portador nos poços quânticos, obtém-se uma equação transcendental, a partir da qual se pode calcular

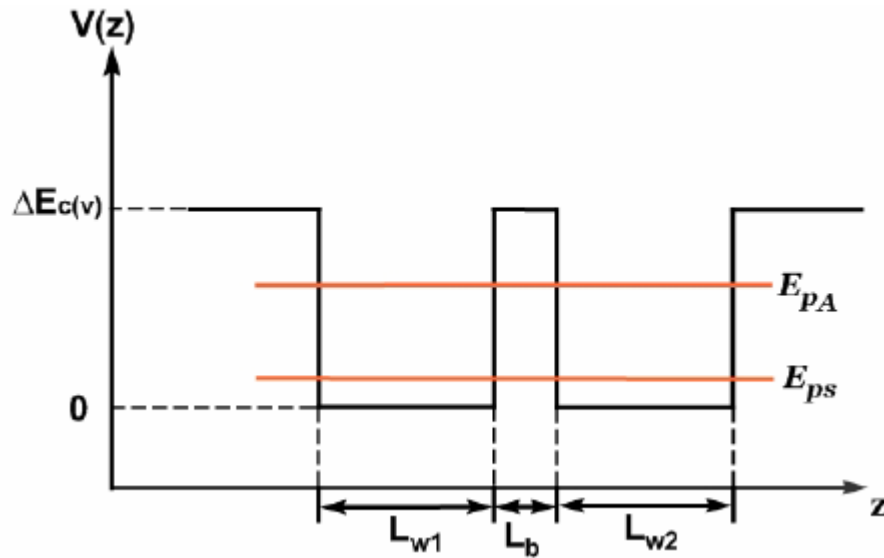


Figura 6.4 – Perfil de potencial de um PQDS ao longo da direção de crescimento, z .

os níveis de energia E_p

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \pm \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) = 0 \quad (6.40)$$

em que L_b é a largura da barreira de separação entre os poços, ζ é um parâmetro sem representação física, definido como:

$$\zeta = \frac{\kappa_b m_w^*}{k_w m_b^*} \quad (6.41)$$

e k_w e κ_b são os vetores de onda no interior do poço e na região das barreiras, respectivamente, e são dados por:

$$k_{we(\hbar)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{we(\hbar)}^* E_p} \quad (6.42)$$

e

$$\kappa_{be(\hbar)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(\hbar)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (6.43)$$

em que m_w^* e m_b^* são as massa efetivas dos portadores nas regiões dos poços e das barreiras de potencial, respectivamente, $\Delta E_{c(v)}$ é o potencial dos poços (os subscritos c e v representa o potencial dos poços para elétrons e buracos, respectivamente), E_p é a energia do estado assumido pelo portador no poço quântico duplo. A Equação (6.40) é uma equação

transcendental, e por esta razão suas soluções, isto é, as auto-energias E_p associadas aos estados dos portadores no poço quântico duplo, só podem ser obtidas numericamente e/ou graficamente.

De maneira similar à que foi feita em poços quânticos simples, os vetores de onda precisam ser transformados quanto à sua dimensão. Como a massa é dada em quilogramas (Kg) e a energia é dada em elétron-volts (eV), ou seja, essas grandezas estão em sistemas de unidades diferentes, é necessário introduzir um fator multiplicativo para que os vetores de onda k_w e κ_b tenham a dimensão cor reta de m^{-1} . Se \hbar for dado em elétron-volts vezes segundo ($eV \times s$) esse fator será

$$2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \quad (6.44)$$

Portanto, os vetores de onda podem ser expressos como:

$$k_w(m^{-1}) = 2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_w^*(Kg)E_p(eV)}}{\hbar(eV \times s)} \quad (6.45)$$

e

$$\kappa_b(m^{-1}) = 2.498 \times 10^9 \left(\frac{s \times eV^{\frac{1}{2}}}{Kg^{-\frac{1}{2}} \times m^{-1}} \right) \frac{\sqrt{2m_b^*(Kg)(\Delta E_{c(v)} - E_p)(eV)}}{\hbar(eV \times s)} \quad (6.46)$$

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

Pode-se notar que os vetores de onda estão expressos em função da energia E_p . Assim, para se calcular os níveis de energia E_p , deve-se substituir as Eqs. (6.45) e (6.46) na Eq. (6.40) e, então, graficar-se, em um mesmo ambiente gráfico, as seguintes expressões:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \times E_p \quad (6.47)$$

e

$$\mp \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) \times E_p \quad (6.48)$$

sendo que o sinal positivo refere-se aos estados pares, enquanto que o sinal negativo refere-se aos estados ímpares, e $p = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal. Como estas expressões são funções apenas de E_p , a intersecção das curvas fornece o valor do nível de eV .

6.5 EXTENSÃO DO FORMALISMO MLC PARA POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS

Para que o modelo *MLC* se aplique aos sistemas de poços quânticos duplos é necessário definir uma largura efetiva $L_{w,eff}^*$, para que o poço quântico duplo possa ser representado como um poço quântico simples. Como discutido no capítulo 5, Zhao et al. [26] propuseram a seguinte expressão para representar um poço quântico duplo por um poço quântico simples:

$$L_{w,eff} = L_{w1} + L_{w2} \exp(-L_b K_b) \quad (6.49)$$

em que L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços individuais, L_b é a largura da barreira de separação entre os poços e K_b é o vetor de onda que caracteriza a penetração do éxciton na barreira central, e é dado pela Eq. (5.39). Feita essa aproximação, basta substituir L_w por $L_{w,eff}^*$ em (6.12) e (6.31), e utilizar o modelo *MLC* como se fosse em um poço quântico simples, porém de largura $L_{w,eff}^*$.

CAPÍTULO 7 – DESCRIÇÃO DAS AMOSTRAS E DAS TÉCNICAS EXPERIMENTAIS UTILIZADAS

Neste capítulo será feita uma descrição das amostras estudadas neste trabalho e das técnicas de espectroscopia óptica utilizadas para a caracterização óptica das mesmas.

São duas amostras, sendo que a primeira delas consiste de dois sistemas: um poço quântico simples de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$ e um poço quântico duplo de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$ e barreira central de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$. A segunda amostra consiste de dois sistemas de poços quânticos duplos de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$ e barreiras centrais de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$.

Foram realizadas medidas de fotoluminescência (PL) e a medidas de fotoluminescência com aplicação de campo magnético (magnetofotoluminescência (MPL)) a baixas temperaturas.

7.1 AMOSTRAS

A Figura 7.1 mostra o esquema de crescimento das duas amostras, denominadas 2606 e 2607.

A primeira delas (2606) é composta por um poço quântico simples de 80Å de espessura e um poço quântico duplo de 95Å de largura total, sendo que a barreira central tem espessura de 15Å .

Sobre um substrato de $GaAs$, orientado na direção (001), foi crescida uma camada

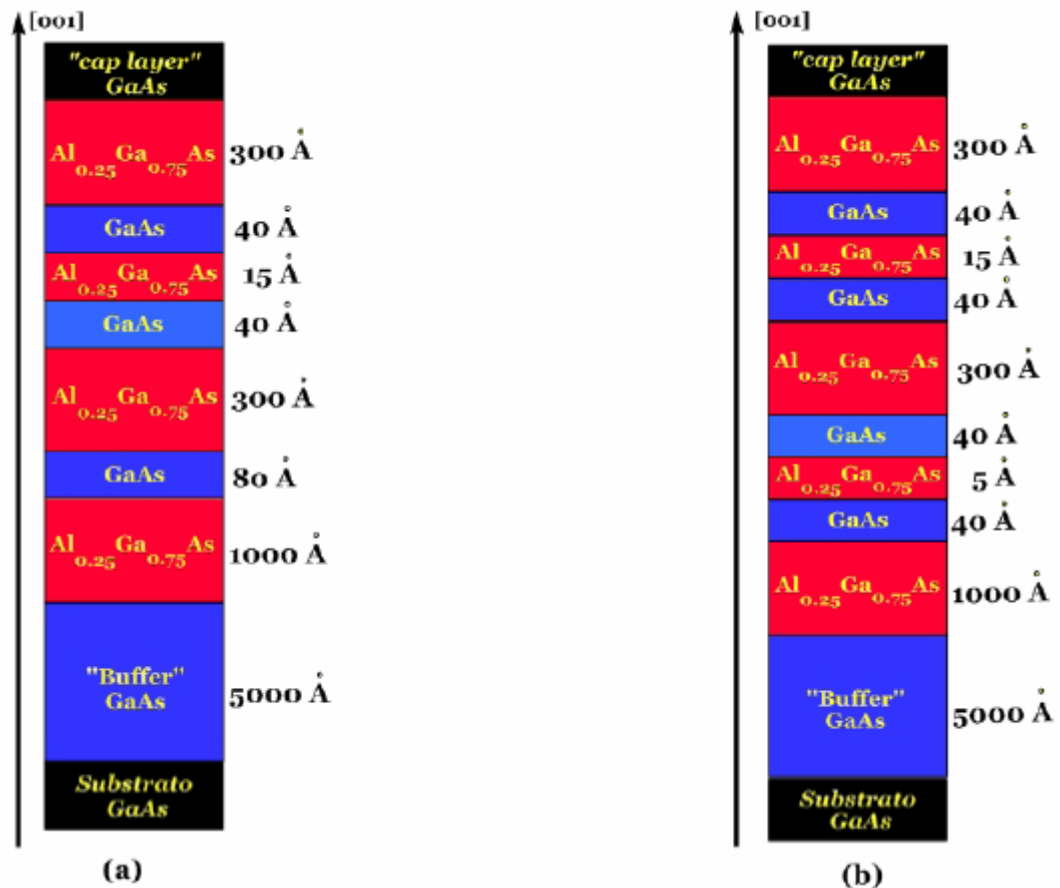


Figura 7.1 – Esquema de crescimento das amostras. (a) Amostra 2606. (b) Amostra 2607.

“buffer” de $GaAs$ de 5000Å. Sobre a camada “buffer” foi crescida uma camada de 1000Å da liga ternária $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$. Sobre a liga ternária foi crescida a estrutura de poço quântico simples, ou seja, foi crescida uma camada de $GaAs$ com 80Å e outra camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 300Å de espessura. Sobre a liga ternária foi crescida a estrutura de poço quântico duplo, ou seja, foi crescida uma camada de $GaAs$ com 40Å de espessura (primeiro poço), uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 15Å de espessura, uma camada de $GaAs$ com 40Å (segundo poço) de espessura e uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 300Å de espessura. Finalizando a amostra, foi crescidas uma camada de 50Å de $GaAs$ (“cap layer”).

A segunda amostra (2607) é composta basicamente por dois poços quânticos duplos com barreiras centrais de 5Å e 30Å de espessura, e com poço individuais de 40Å de espessura cada um deles. a seguir são dados os detalhes desta amostra.

Sobre um substrato de $GaAs$, orientado na direção (001), foi crescida uma camada “buffer” de $GaAs$ de 5000Å. Sobre a camada “buffer” foi crescida uma camada de

1000Å da liga ternária $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$. Sobre a liga ternária foi crescida a primeira estrutura de poço quântico simples, ou seja, foi crescida uma camada de $GaAs$ com 40Å de espessura (primeiro poço), uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 5Å de espessura (barreira central), uma camada de $GaAs$ com 40Å (segundo poço) de espessura e uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 300Å de espessura. Sobre o ternário de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 300Å de espessura foi crescida a segunda estrutura de poço quântico duplo, ou seja, foi crescida uma camada de $GaAs$ com 40Å de espessura (primeiro poço), uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 30Å de espessura (barreira central), uma camada de $GaAs$ com 40Å (segundo poço) de espessura e uma camada de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 300 espessura. Finalizando a amostra, foi crescida uma camada de 50Å de $GaAs$ ("cap layer").

Esse conjunto de amostras foi utilizado neste trabalho. Como os poços individuais que compõem os poços quânticos duplos possuem 40Å de espessura, estudou-se, teoricamente, um poço quântico simples de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com 40Å de espessura.

7.1.1 Parâmetros das Amostras

Os parâmetros dos materiais $GaAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$ são resumidos na Tabela 7.1. Esses parâmetros são os mesmo utilizados no trabalho de Zhao et al. [26]. Além destes parâmetros

Tabela 7.1 – Parâmetro dos materiais $GaAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$.

	$GaAs$	$Al_xGa_{1-x}As$
m_{eo}	$0.0667 m_0$	$(0.0667 + 0.083x) m_0$
m_{hho}	$0.34 m_0$	$(0.34 + 0.42x) m_0$
m_{lho}	$0.094 m_0$	$(0.094 + 0.043x) m_0$
ϵ	12.5	$12.5(1 - x) + 9.8x$

supõe-se que a diferença na energia de “gap” entre os materiais do poço (*GaAs*) e da barreira (*Al_xGa_{1-x}As*) seja dada por [26]:

$$\Delta E(x) = 1.455x \quad (7.1)$$

e os "off-sets" da banda de condução (ΔE_c) e da banda de valência (ΔE_v) sejam dados, respectivamente, por [26]:

$$\Delta E_c(x) = 0.65\Delta E(x) \quad (7.2)$$

e

$$\Delta E_v(x) = 0.35\Delta E(x) \quad (7.3)$$

em que x é a concentração de alumínio do material da barreira, ϵ é a constante dielétrica, m_{e0} , m_{hh0} e m_{lh0} são as massas efetivas do elétron, do buraco pesado e do buraco leve, respectivamente.

7.2 A TÉCNICA DE FOTOLUMINESCÊNCIA

7.2.1 Princípios Físicos da Fotoluminescência

Medidas ópticas em função da potência de excitação, em função da temperatura, ou na presença de campos elétricos e/ou magnéticos são largamente utilizadas no estudo das propriedades eletrônicas e ópticas de materiais semicondutores. Dentre estas técnicas ópticas destacam-se a fotoluminescência (PL), a fotoluminescência de excitação (PLE) e a fotorefletância (PR). Tais técnicas ópticas podem fornecer informações importantes para o estudo e caracterização de um determinado material ou estrutura semicondutora como, por exemplo, a energia de "gap", a qualidade da amostra (condições cristalográficas, etc.), a natureza e a concentração de impurezas, etc. Essas técnicas têm sido bastante utilizadas no estudo das propriedades de materiais e heteroestruturas de semicondutoras por apresentarem muitas vantagens, dentre elas, a de serem técnicas não destrutivas e não requererem preparação especial da amostra. A fotoluminescência consiste basicamente em estudar os

processos que envolvem a emissão de radiação eletromagnética pelo material, devida aos processos de recombinação, através da análise espectral da radiação emitida quando o material é excitado por radiação eletromagnética de energia geralmente maior do que a energia de “gap”. A 0 K um semiconductor puro comporta-se como um material isolante, pois nesta condição todos os elétrons estão na banda de valência e não possuem energia suficiente para vencer o "gap" de energia entre o topo dessa banda e o mínimo da banda de condução. Contudo, se houver a incidência de luz no material com energia maior que esse "gap" ($\hbar\omega > E_g$), haverá energia suficiente para que os elétrons da banda de valência sejam promovidos a estados excitados na banda de condução. Assim, a absorção de luz gera pares elétron-buraco ($e-h$), fazendo com que o material semiconductor fique em um estado excitado. O estado fundamental tende a ser restabelecido naturalmente com a emissão da energia excedente, o que pode ocorrer basicamente em duas etapas: i) relaxação dos elétrons e buracos para o fundo da banda de condução e topo da banda de valência, respectivamente, através da emissão de fônons. ii) emissão radiativa com energia correspondente à diferença de energia entre as duas bandas, $\hbar\omega_{PL}$, e a conseqüente recombinação do par elétron-buraco ($e-h$) (Fig. 5.2). A Figura 5.2 mostra um diagrama

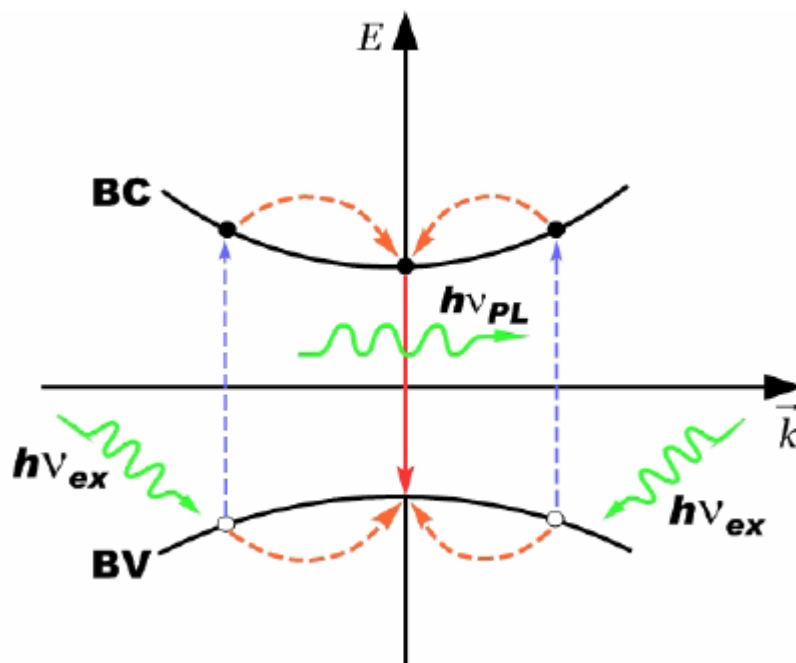


Figura 7.2 – Formação e recombinação do par elétron-buraco.

ilustrativo da criação e aniquilação de pares $e-h$ pela técnica de fotoluminescência. A luz incidente no material com energia $h\nu_{ex}$ promove elétrons da BV para a BC, gerando o par $e-h$. Após a formação dos pares $e-h$, através da absorção de luz, tanto os elétrons quanto os buracos foto-criados tendem a relaxar para os respectivos estados de mais baixa energia. Porém como são portadores de cargas, eles sofrem interação coulombiana e podem formar um estado ligado que, como visto no capítulo 2, denomina-se éxciton. A energia de ligação coulombiana entre essas duas cargas nos materiais volumétricos $III-V$ é da ordem de 5 meV . Essa energia é pequena e temperaturas da ordem de 60 K fazem com que a energia de vibração dos átomos constituintes da rede cristalina quebrem o vínculo entre o elétron e o buraco. O confinamento dos portadores de carga no poço quântico obriga-os a permanecerem mais próximos, implicando em um aumento da interação coulombiana entre esses portadores de carga (elétrons e buracos), de tal modo que o raio do éxciton diminui em relação ao material volumétrico. No caso dos semicondutores de "gap" direto a recombinação entre o par $e-h$ se dá verticalmente no espaço dos momentos e pode ocorrer diretamente entre o mínimo de energia da BV e o topo da BC, sendo que o excesso de energia $h\nu_{PL}$ é emitido na forma de radiação eletromagnética.

Apesar de haver fenômenos mais complexos por trás do processo de recombinação de pares $e-h$, como por exemplo, emissão de plasmons e/ou espalhamento elétron-elétron, durante a relaxação para o fundo da BC (ou topo da BV, se forem buracos), e recombinações envolvendo impurezas, tais fenômenos não serão discutidos neste trabalho.

As amostras utilizadas nesse trabalho foram submetidas a medidas de fotoluminescência a baixa temperatura 10 K e 11 K e medidas de magnetofotoluminescência (a 4 K) com aplicação de campo magnético até 12 T.

7.2.2 Sistema Experimental de Fotoluminescência

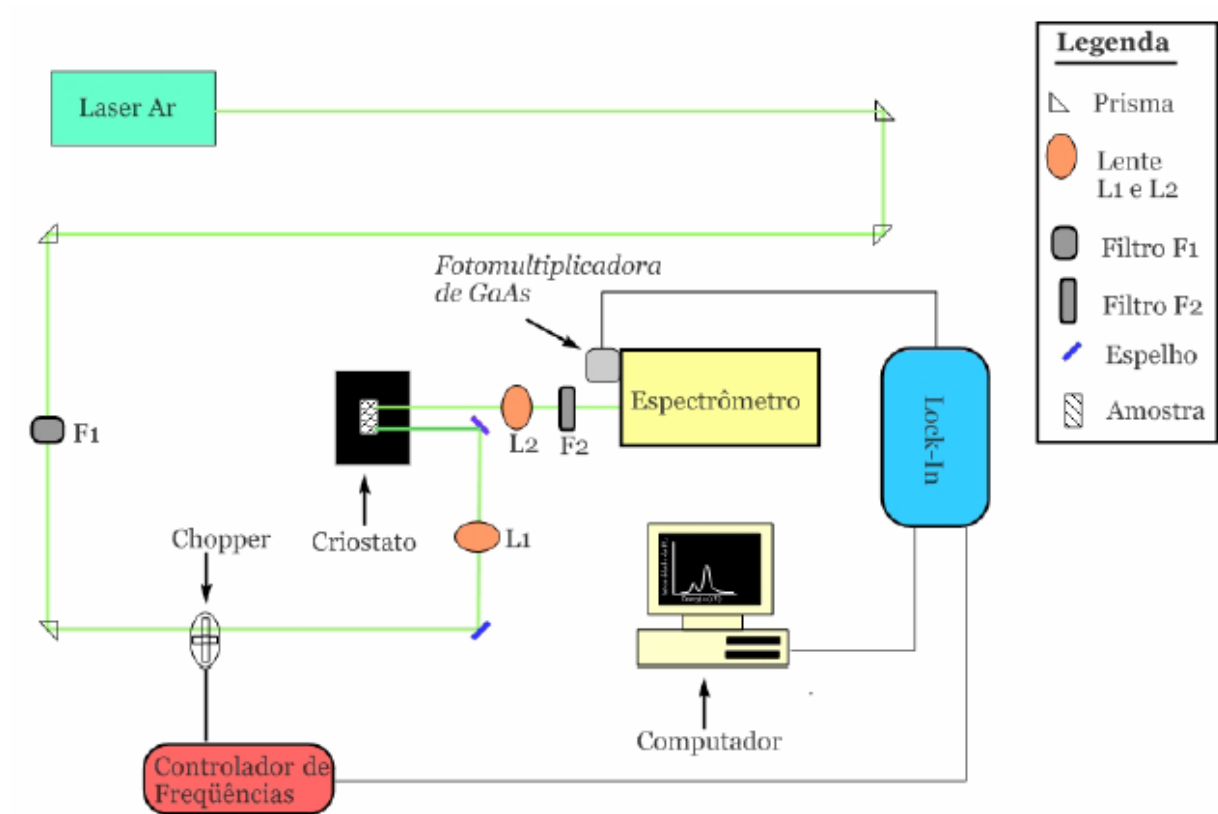


Figura 7.3 – Sistema experimental da fotoluminescência.

As medidas de fotoluminescência foram realizadas utilizando-se a montagem experimental mostrada na Fig. 7.3, existente no laboratório de Óptica e Optoeletrônica do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina. Abaixo, segue a descrição desse sistema experimental. O sistema de excitação é composto por um laser de Ar^+ emitindo em 5145Å , devidamente refrigerado a água, cuja potência pode ser variada através do controle da corrente (não mostrado) e de filtros de densidade neutra (F_1). Um conjunto de prismas é utilizado para direcionar o feixe do "laser" de Ar^+ até uma lente convergente (L_1), que focaliza o feixe do "laser" na amostra, a qual é fixada num porta-amostras por meio de uma tinta condutora (tinta prata), dentro de um criostato *Janis* de ciclo fechado de *He*. O diâmetro do "spot" do "laser" que atinge a amostra é de aproximadamente

$260\mu\text{m}$. A luminescência da amostra é focalizada por uma segunda lente convergente (L_2) na fenda de entrada do espectrómetro (monoeromador *Jarrel Ash* de 0.5m de distância focal, com grade de difração de 600 ranhuras por mm e "blaze" em 1200\AA cuja grade de difração é movida por um motor de passo, fazendo assim a varredura do monoeromador em comprimentos de onda. Na fenda de entrada do espectrómetro é inserido um filtro (F_2) que impede a passagem da luz espalhada pelo "laser". O sistema de detecção utilizado nestas medidas é composto por uma fotomultiplicadora de *GaAs*, cuja região de resposta é aproximadamente de 1850\AA a 9100\AA , que envia o sinal detectado para um amplificador "lock-in", o qual amplifica o sinal modulado e o envia para o sistema de aquisição de dados que processa as informações e que são registradas e armazenadas por um microcomputador. A temperatura pode ser variada desde aproximadamente 8 K, através de um controlador de temperatura (*LakeShore modelo 331*)(não mostrado), até 300K.

7.2.3 Fotoluminescência com Aplicação de Campo Magnético

Os princípios físicos da magnetofotoluminescência (fotoluminescência com aplicação de campo magnético) são os mesmos da fotoluminescência, descritos anteriormente, porém as medidas de fotoluminescência são feitas com a aplicação de campo magnético na amostra. A Figura 7.4 mostra o sistema experimental utilizado na obtenção dos espectros de magnetofotoluminescência. As medidas foram realizadas no Instituto de Física da Universidade Federal de Minas Gerais, com a colaboração de Élder Mantovani Lopes, que foi responsável pelas medidas.

A amostra é colocada em um porta-amostra, fixado em uma haste, e é inserido no interior de um magneto supercondutor, refrigerado a 4 T, que opera entre zero e 12 T. Na haste há um diodo de silício, o qual é utilizado como sensor de temperatura. Para controlar a temperatura da amostra utiliza-se um controlador de temperatura em um sistema de fluxo de hélio, sendo esse hélio obtido, através de uma válvula agulha, do próprio banho de hélio líquido que resfria a bobina supercondutora.

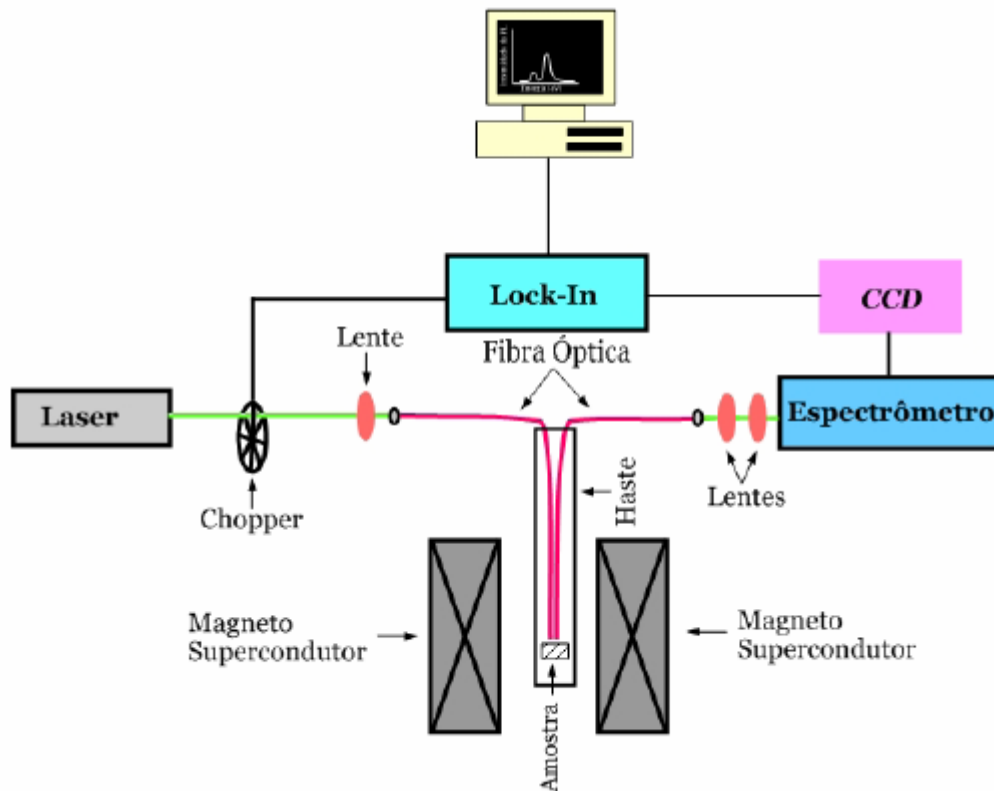


Figura 7.4 – Sistema experimental da magnetofotoluminescência.

Para a excitação da amostra é utilizado um "laser" de argônio que opera no comprimento de onda de 5140\AA , e o seu sinal chega até a amostra através de uma fibra óptica. A potência incidente na fibra óptica é de $\approx 10\text{ mW}$ e a potencia incidente na amostra é de $\approx 3.3\text{ mW}$. O diâmetro do "spot" do "laser" que atinge a amostra é de $\approx 400\text{ }\mu\text{m}$. O sinal (PL) emitido pela amostra incide em uma segunda fibra óptica, localizada ao lado da primeira, que o transporta até um conjunto de lentes que focaliza este (sinal de PL) na fenda do espectrômetro. A detecção do sinal é feita por uma CCD com tempo de integração de 5s e 2 acumulações. Para redução de ruído e aumento de sensibilidade, o laser de excitação é modulado por um "chopper", que opera em uma determinada frequência. Essa frequência é usada como sinal de referência por um filtro-amplificador "lock-in", que compara a frequência do sinal de entrada (vindo do detector) com a frequência do sinal de referência (do "chopper"). O sinal é então amplificado e mandado para um computador, o qual gera o espectro de *intensidade do sinal de PL x comprimento de onda (energia)*.

O campo magnético foi aplicado ao longo da direção z, que é a direção de crescimento da amostra [001]. A luz incidente na amostra também está aplicada ao longo da

direção de crescimento da amostra. Essa configuração experimental denomina-se *configuração de Faraday*. Em outras palavras, a configuração de Faraday "*descreve a propagação da radiação incidente paralelo a um campo magnético externo aplicado em experimentos magneto-ópticos.*" Outros trabalhos que também enfocam a determinação da energia

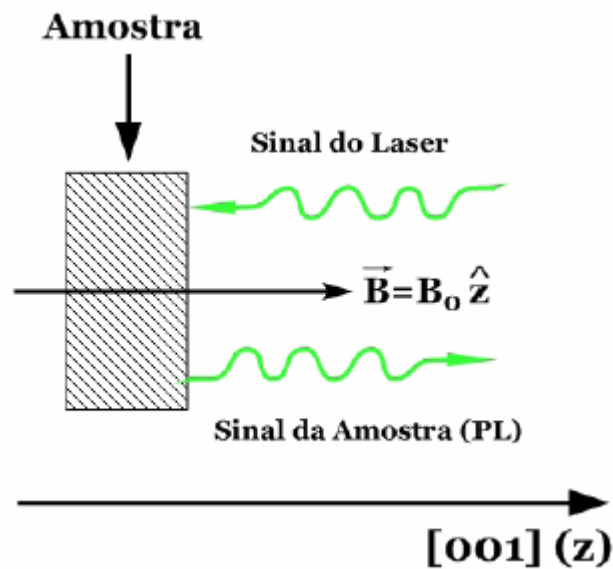


Figura 7.5 – Esquema de um experimento magneto-óptico feito na configuração de Faraday.

de ligação excitônica envolvendo medidas com campo magnético são os de Elias [27] e Valadares [28].

CAPÍTULO 8 – RESULTADOS TEÓRICOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados teóricos obtidos a partir da metodologia apresentada no capítulo 6. Serão apresentados os cálculos dos níveis de energia para elétrons e buracos em poços quânticos simples e duplos e, a partir destes, os cálculos da energia de ligação excitônica em poços quânticos simples e duplos. Na última parte será feito um estudo sobre a influência da largura do poço, largura da barreira e da concentração de alumínio sobre os níveis de energia dos portadores, a energia de ligação e a dimensionalidade do sistema.

8.1 NÍVEIS DE ENERGIA DOS POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES

De acordo com a metodologia apresentada no capítulo 6, a energia dos portadores de carga no poço quântico pode ser obtida pela seguinte expressão [1]:

$$k_w L_w = p\pi - 2 \arcsin \left[\frac{\frac{k_w}{m_w^*}}{\sqrt{\left(\frac{k_w}{m_w^*}\right)^2 + \left(\frac{\kappa_b}{m_b^*}\right)^2}} \right] \quad (8.1)$$

em que k_w e κ_b são os vetores de onda dos portadores na região do poço e das barreiras, respectivamente, e são dados por [1]:

$$k_w = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_w^* E_p} \quad (8.2)$$

e

$$\kappa_{be(h)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_{be(h)}^* (\Delta E_{c(v)} - E_p)} \quad (8.3)$$

em que m_w^* e m_b^* são, respectivamente, as massa 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 o índice v representa o potencial do poço para buracos), E_p é a energia do estado ocupado pelo portador no poço quântico. O potencial $\Delta E_{c(v)}(x)$, que depende da concentração de alumínio, x , é dado por [26]:

$$\Delta E_c(x) = 0.65\Delta E(x) \quad (8.4)$$

e

$$\Delta E_v(x) = 0.35\Delta E(x) \quad (8.5)$$

em que ΔE representa a diferença entre as energias de “gap” do material da barreira e do poço, e é dado por [26]:

$$\Delta E(x) = E_g^{AlGaAs} - E_g^{GaAs} = 1.455x \text{ (eV)} \quad (8.6)$$

em que x é a concentração de alumínio do material da barreira ($Al_xGa_{1-x}As$).

A Tabela 8.1 resume os resultados obtidos para a amostra de poço quântico simples com largura de 80Å e concentração de alumínio de 25% ($x = 0.25$). Para efeitos de se estudar o efeito do confinamento sobre esta amostra, foi feito o mesmo cálculo para um 40Å o primeiro nível de elétron (e_1), buraco pesado (hh_1) e buraco leve (lh_1).

Tabela 8.1 – Níveis de energia calculados para os PQS's de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com 80Å e 40Å

Amostra	L_w (Å)	e_1 (meV)	hh_1 (meV)	lh_1 (meV)
PQS	80	41.85	10.72	28.30
PQS	40	95.18	28.91	61.24

8.2 NÍVEIS DE ENERGIA DOS POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS

De acordo com a metodologia descrita no capítulo 6, os níveis de energia dos portadores no poço quântico duplo simétrico podem ser obtidos a partir da seguinte equação:

$$2 \cos(k_w L_w) + \left[\zeta - \frac{1}{\zeta} \right] \sin(k_w L_w) \pm \left[\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \exp(-\kappa_b L_b) \sin(k_w L_w) = 0 \quad (8.7)$$

em que

$$\zeta = \frac{\kappa_b m_w^*}{k_w m_b^*}, \quad (8.8)$$

L_b é a barreira de separação entre os poços, k_w e κ_b são os vetores de onda, respectivamente, na região dos poços e das barreiras, e são dados por:

$$k_w = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_w^* E} \quad (8.9)$$

e

$$\kappa_b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_b^* (\Delta E_{c(v)} - E)} \quad (8.10)$$

em que 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, E_p é a energia do estado assumido pelo portador no poço quântico. Os potenciais $\Delta E_{c(v)}(x)$, que dependem da concentração de alumínio, x , são os mesmos dados pelas Eqs. (8.4), (8.5) e (8.6).

A Tabela 2 resume os resultados obtidos para as amostras de poços quânticos duplos descritas no capítulo 7.

Tabela 8.2 – Níveis de energia calculados para os PQDs com barreira central de 5Å, 15Å e 30Å.

Amostra	L_b (Å)	e_{1S} (meV)	e_{1A} (meV)	hh_{1S} (meV)	hh_{1A} (meV)
PQD	5	55.78	144.91	18.95	37.69
PQD	15	72.96	123.16	25.65	32.14
PQD	30	85.48	106.56	28.26	29.56

8.3 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES

Seguindo a metodologia descrita no capítulo 6, a energia de ligação de excitons em poços quânticos simples é dada, para o estado $1S$, por:

$$E_{1s} = - \left[\frac{2}{\alpha - 1} \right]^2 E_0^* \quad (8.11)$$

em que a é a dimensionalidade do sistema, E_0^{ast} é a energia de ligação do éxeiton, em um material volumétrico, com as várias correções propostas pelo método MLC, e são dados, respectivamente, por:

$$\alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_w^*}{2a_0^*}\right) \quad (8.12)$$

$$E_0 = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon^*}\right)^2 \left(\frac{\mu^*}{m_0}\right) R_y \quad (8.13)$$

em que L_w^* é a largura efetiva do poço quântico, a_0^* é o raio de Bohr do éxeiton, em um material volumétrico, com as várias correções propostas pelo método MLC, e é dado por:

$$a_0^* = \left(\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon_0}\right) \left(\frac{m_0}{\mu^*}\right) a_B \quad (8.14)$$

em que ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo, m_0 é a massa do elétron livre, ε^* é a permissividade do meio, μ^* é a massa reduzida efetiva do éxeiton, R_y é o Rydberg efetivo e a_B é o raio de Bohr. As correções propostas pelo método MLC estão embutidas nos parâmetros ε^* e μ^* . A energia de ligação excitônica e a dimensionalidade do sistema para o poço quântico simples de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com 80Å de espessura e para o poço de referência (para os poços duplos) com 40Å de espessura, calculada utilizando-se as Eqs. (8.16) e (8.15), são mostrados na Tabela 3.

Tabela 8.3 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para o PQS de 80Å de espessura e para o poço de 40Å de espessura.

Amostra	L_w (Å)	éxciton	E_b (meV)	α
PQS	80	$e_1 - hh_1$	9.81	2.41
PQS	40	$e_1 - hh_1$	11.77	2.35

Como esperado, conforme a largura do poço quântico diminui de 40Å para 80Å a dimensionalidade (α) diminui, a interação entre os portadores de carga (elétrons e buracos) aumenta e a energia de ligação (E_b) aumenta.

8.4 CÁLCULO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS

Para os poços quânticos duplos, as expressões para o cálculo da energia de ligação é a mesma utilizada em sistemas de poços quânticos simples, porém, para que a expressão seja utilizada corretamente é necessário substituir L_w^* por $L_{w,eff}^*$.

A expressão para o cálculo da energia de ligação, para o estado 1S do éxciton, é dada por:

$$E_{1s} = - \left[\frac{2}{\alpha - 1} \right]^2 E_0^* \quad (8.15)$$

em que α é a dimensionalidade do sistema e E_0^* é a energia de ligação do éxciton, em um material volumétrico, com as várias correções propostas pelo método *MLC*, e são dados, respectivamente, por:

$$\alpha = 3 - \exp\left(-\frac{L_{w,eff}^*}{2a_0^*}\right) \quad (8.16)$$

$$E_0^* = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon^*}\right)^2 \left(\frac{\mu^*}{m_0}\right) R_y \quad (8.17)$$

em que a_0^* é o raio de Bohr para um éxciton, em um material volumétrico, com as várias correções propostas pelo método *MLC*, e $L_{w,eff}^*$ é a largura efetiva do poço duplo (aproximação de um poço duplo em um poço simples), e são dados, respectivamente, por:

$$a_0^* = \left(\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon_0}\right) \left(\frac{m_0}{\mu^*}\right) a_B \quad (8.18)$$

$$L_{w,eff} = L_{w1} + L_{w2} \exp(-L_b K_b) \quad (8.19)$$

em que ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo, m_0 é a massa do elétron livre, ε^* é a permissividade do meio, μ^* é a massa reduzida efetiva do éxciton, R_y é o Rydberg efetivo e a_B é o raio de Bohr, L_{w1} e L_{w2} são as larguras dos poços quânticos duplos, L_b é a largura da barreira e K_b é o vetor de onda característico dado pela Eq. (5.39). As correções propostas pelo método *MLC* estão embutidas nos parâmetros ε^* e μ^* . A energia de ligação excitônica e a dimensionalidade do sistema para os poços quânticos duplos simétricos de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$ com espessura de 40Å e barreiras de larguras 5Å, 15Å e 30Å, calculadas utilizando-se as Eqs. (8.20) e (8.19), são mostrados na Tabela 4.

8.5 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS TEÓRICOS

8.5.1 Influência da Largura do Poço e da Concentração de Alumínio sobre os Níveis de Energia do PQS

Os níveis de energia de um poço quântico simples podem ser alterados por dois fatores: variação na largura (L_w) do poço quântico e variação no potencial de confinamento

Tabela 8.4 – Energia de ligação excitônica (E_b) e dimensionalidade (α) para os PQDs com barreira central de 5Å, 15Å e 30Å.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	éxciton	E_b (meV)	α
PQD	5	$e_{1s} - hh_{1s}$	10.11	2.40
PQD	15	$e_{1s} - hh_{1s}$	10.56	2.39
PQD	30	$e_{1s} - hh_{1s}$	11.03	2.37

($\Delta E_c(x)$ e $\Delta E_v(x)$) dos portadores, que dependem diretamente da concentração de alumínio, x , da liga $Al_xGa_{1-x}As$. Utilizando a Eq.(8.1), foram feitos dois gráficos que mostram a variação dos níveis de energia em função destes parâmetros.

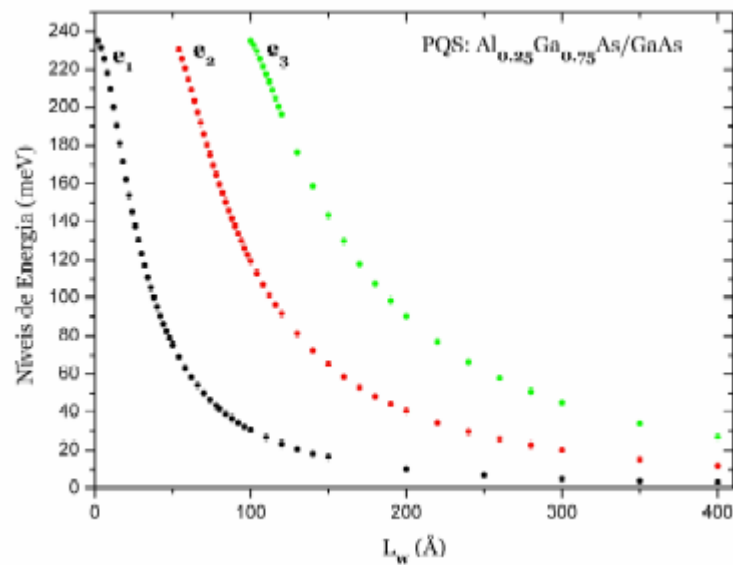


Figura 8.1 – Variação dos níveis de energia dos níveis e_1 , e_2 e e_3 de elétrons com a largura do PQS de $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$.

O primeiro deles (Fig. 8.1) mostra o comportamento dos níveis de energia em função da largura, L_w : do *poço* quântico simples com concentração de *Al* de 25% ($x = 0.25$). Observa-se que, à medida que a largura do PQS aumenta, os níveis diminuem sua energia, se aproximam uns dos outros e do fundo do poço quântico, tomado como zero em energia. Dessa forma, à medida que o poço vai se alargando estes níveis tenderão cada vez mais a se aproximar do fundo do poço, ou do zero em energia, sendo que no limite $L_w \rightarrow \infty$ os níveis pertencerão ao material “bulk” *GaAs*. Analisando no outro sentido, ou seja, quando o poço vai se estreitando, observa-se que, os efeitos de confinamento vão se tornando mais acentuados e os níveis de energia deslocam-se para regiões de maiores energias e o espaçamento entre estes também aumenta. À medida que o poço vai ficando mais estreito, os níveis se aproximam cada vez mais do topo do poço quântico, de modo que no limite $L_w \rightarrow 0$ todos os níveis pertencerão ao material “bulk” $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$.

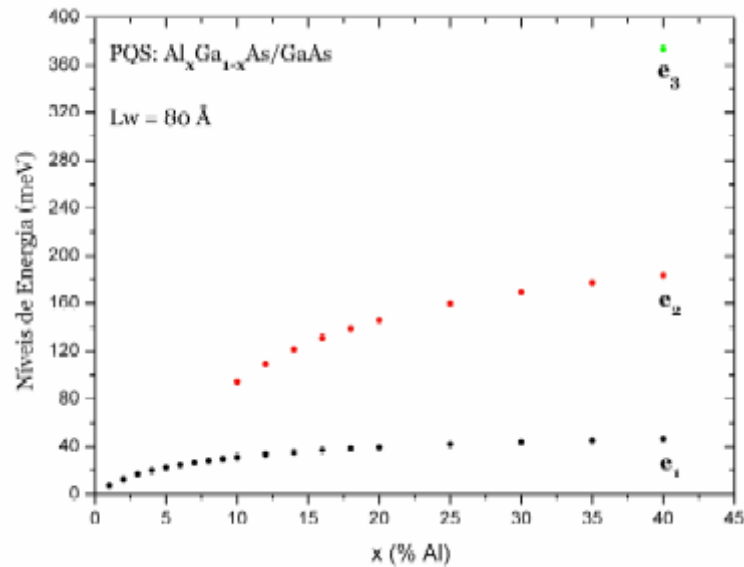


Figura 8.2 – Variação dos níveis de energia e_1 e e_2 e e_3 de elétrons com a altura do PQS de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Note que o nível e_3 (apenas um ponto) só aparece para $x \approx 40\%$ Al

O segundo gráfico (Fig. 8.2) mostra o comportamento dos níveis de energia em função da concentração de alumínio, ou seja, em função da altura da barreira de potencial ($\Delta E_{c(v)}$) do poço quântico. O aumento desta barreira, por meio do aumento da concentração de alumínio na liga $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, faz com os portadores fiquem mais confinados na região do poço quântico e, novamente, o efeito do confinamento sobre os níveis de energia faz com que estes se distanciem entre si e se desloquem para regiões de maiores energias.

8.6 INFLUÊNCIA DA LARGURA DA BARREIRA CENTRAL SOBRE OS NÍVEIS DE ENERGIA DO POÇO QUÂNTICO DUPLO

Os efeitos da largura do poço e da concentração de alumínio sobre os níveis de energia do poço quântico duplo são semelhantes aos do poço quântico simples. Em sistemas de poços quânticos duplos, é interessante analisar o comportamento dos níveis de energia em função da largura da barreira, L_b , que separa os poços simples. A Figura 8.3 mostra o comportamento destes níveis em função da largura desta barreira. Os poços

simétricos possuem largura fixa de 40\AA cada um, e a concentração de alumínio na liga ternária é de 25%.

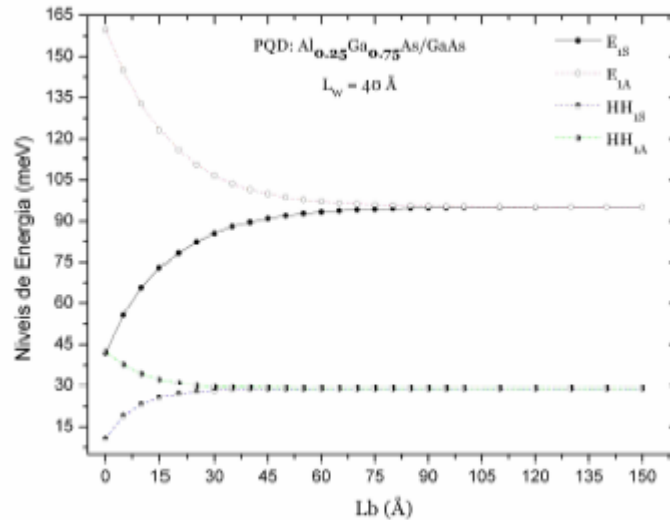


Figura 8.3 – Variação dos níveis de energia (e_{1S}, e_{1A}, hh_{1S} e hh_{1A}) com a largura da barreira de separação para um PQDS de $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$. A largura dos poços é 40\AA

Quando a barreira de separação é nula ($L_b = 0$) os níveis simétrico e anti-simétrico evoluem para o primeiro e segundo níveis de energia de um poço quântico simples de largura 80\AA . Quando a barreira de separação é muito espessa, $L_b \gtrsim 110 \text{\AA}$, as funções de onda não se sobrepõem e o sistema comporta-se como um constituído de dois poços quânticos simples isolados, sendo seus níveis de energia descritos pela teoria de poços quânticos simples. No caso intermediário, em que a barreira de separação é estreita o suficiente para que as funções se sobreponham, observa-se uma abertura ("split") dos níveis de energia em dois níveis, um de menor energia (simétrico, e_{1S}) e outro de maior energia (anti-simétrico, e_{1A}). Nota-se que os níveis para buracos sofrem uma abertura menor que os níveis de elétrons, sendo que para $L_b \approx 50\text{\AA}$ já não há uma abertura significativa entre os níveis simétrico e anti-simétrico.

8.7 COMPORTAMENTO DA ENERGIA DE LIGAÇÃO E DA DI-DIMENSIONALIDADE EM FUNÇÃO DA LARGURA DO POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS

A Figura 8.4 mostra uma representação de L_w em sistemas de poços quânticos simples e duplos. Já a Figura 8.5 mostra o comportamento da energia de ligação excitônica em L_w mesmo gráfico tanto os sistemas de poços quânticos simples e duplos, para ver a evolução da energia de ligação excitônica em função da largura da barreira de separação entre os poços simples.

Antes de analisar a Figura 8.5, é necessário esclarecer sobre o significado da largura do poço, L_w , utilizada na construção das curvas das Figs. (8.5) e (8.6). Para os poços quânticos simples, L_w representa a largura física do poço. Assim, para determinar a energia de ligação de um PQS com 50Å de largura, basta localizar este valor diretamente em L_w e buscar o valor correspondente em E_b (o mesmo vale para a dimensionalidade α). Para os poços duplos simétricos, é importante lembrar que eles são constituídos de dois poços simples de largura L_w e uma barreira central de largura L_b . Então, por exemplo, para $L_w = 50 \text{ \AA}$, na Fig.4, significa que o poço duplo terá uma largura total de 100Å mais a largura da barreira, L_b . Portanto, para se comparar o valor da energia de ligação (ou da dimensionalidade α) entre o PQS de 80Å e o poço quântico duplo com barreira central de 5Å e poços individuais de 40Å cada (totalizando 85Å), basta localizar o valor de E_b correspondente a uma largura de 80Å para o PQS, e o valor de E_b correspondente a uma largura de 40Å para o PQD. A Figura 8.4 abaixo mostra um esquema da representação de L_w nos dois sistemas. Na Figura 8.5, o "PQS SPK 1" representa um poço quântico simples (situação em que a barreira de separação entre os poços simples é suficientemente espessa para não haver acoplamento entre os poços.)

Quando os poços são muito largos, a interação entre o par elétron-buraco é muito

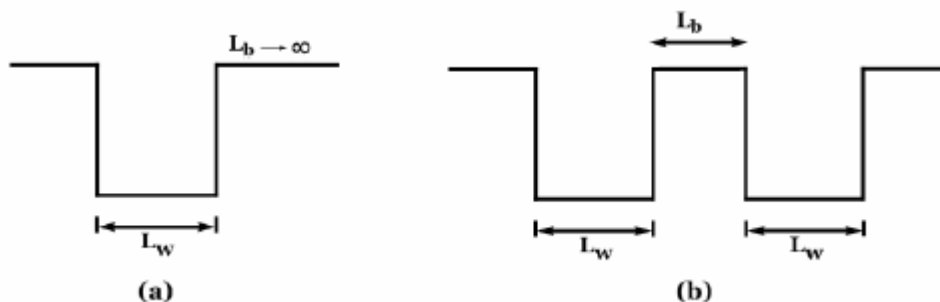


Figura 8.4 – Representação de L_w em sistemas de PQS e PQD.

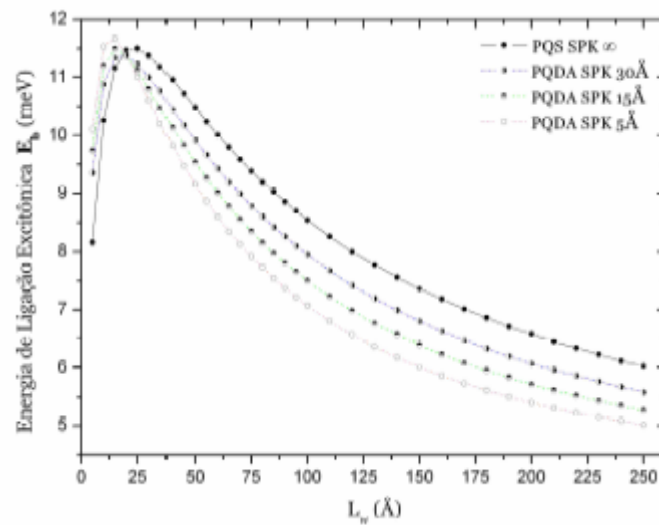


Figura 8.5 – Comportamento da energia de ligação em função da largura dos poços quânticos simples e duplo de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$.

fraca, de modo que a energia de ligação excitônica diminui à medida que o poço vai alargando. Para fraca, de modo que a energia de ligação excitônica diminui à medida que o poço vai alargando. Para um poço muito largo a energia de ligação excitônica tende à energia de ligação do material “bulk” $GaAs$. Diminuindo-se a largura dos poços, a interação entre o par elétron-buraco aumenta e, conseqüentemente, a energia de ligação também aumenta.

Esse aumento se dá até uma região crítica, em torno de 25\AA . Nessa região o confinamento é máximo e o par elétron-buraco apresenta uma interação coulombiana máxima, o que proporciona uma energia de ligação excitônica máxima. Para larguras menores que 25\AA era de se esperar que o confinamento aumentasse e a energia de ligação continuasse a aumentar, até atingir o limite de um sistema completamente bidimensional ($2D$). No entanto, a partir da largura crítica, a energia de ligação começa a diminuir. Isso advém do fato de que a diminuição da largura do poço faz com que as funções de onda que descrevem os portadores penetrem cada vez mais nas barreiras de potencial, fazendo com que o sistema restaure a tridimensionalidade cada vez mais, sendo que os portadores apresentarão uma probabilidade cada vez maior de serem encontrados na região das barreiras. Essa penetração das funções de onda provoca uma diminuição do confinamento dos portadores e, conseqüentemente, da interação coulombiana entre eles, fazendo com que a energia de ligação diminua. Desse modo, conforme $L_w \rightarrow 0$ a energia de ligação do poço quântico tende à energia de ligação do material “bulk” $GaAs$.

A Figura 8.5 mostra o comportamento da dimensionalidade em função da largura do poço. O comportamento da curva pode ser explicado também pela penetração das funções de onda na região das barreiras.

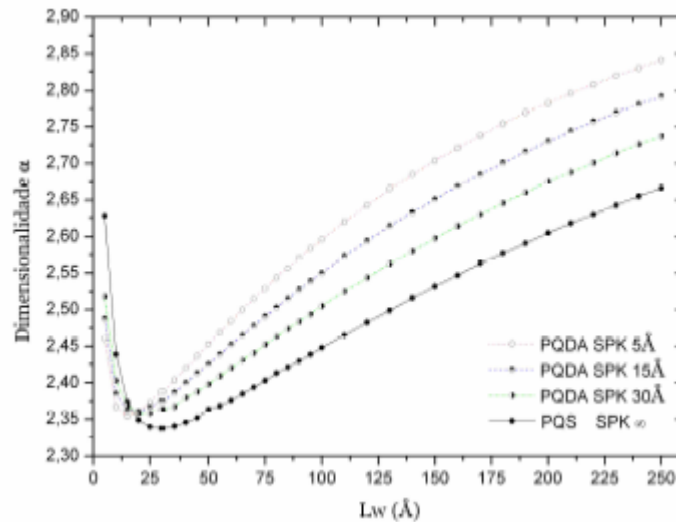


Figura 8.6 – Comportamento da dimensionalidade em função da largura do poço quântico simples e duplo de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$.

Conforme a largura dos poços vai aumentando, a dimensionalidade também aumenta, e os portadores ficam mais confinados na região do poço quântico, dessa forma, no limite $L_w \rightarrow \infty$ tem-se que $\alpha \rightarrow 3$. Ou seja, conforme o poço vai alargando, cada vez mais o sistema evolui para o material "bulk" ($3D$) $GaAs$. Conforme a largura vai diminuindo, a dimensionalidade começa a diminuir, até a região crítica, em torno de 25Å , região essa em que a dimensionalidade é mínima. Diminuindo ainda mais a largura do poço, era de se esperar que a dimensionalidade tendesse para 2, situação de um poço completamente bidimensional ($2D$). No entanto, a penetração da função de onda nas barreiras restaura a tridimensionalidade do sistema e a dimensionalidade começa a aumentar novamente, tendendo para 3. Dessa forma, quando $L_w \rightarrow 0$ a dimensionalidade do sistema tende à dimensionalidade do material "bulk" $GaAs$.

Analisando as Figs. (8.5) e (8.6) observa-se que a região crítica é a mesma para ambos 25Å nessa região os sistemas de poços quânticos simples e duplos apresentam máxima energia de ligação e máximo confinamento, ou seja, mínima dimensionalidade. Para larguras maiores que a região crítica, a barreira determina qual sistema apresentará a menor

dimensionalidade e, conseqüentemente, a maior energia de ligação. A Figura (8.7) apresenta o comportamento dessas grandezas (energia de ligação excitônica e dimensionalidade) em função da largura da barreira de separação entre os poços. Como esperado, a energia de ligação aumenta com a largura da barreira, enquanto que a dimensionalidade diminui com o aumento desta. Fisicamente, isso significa que o desacoplamento entre os poços diminui a dimensionalidade do sistema, ou seja, o movimento dos portadores fica mais restrito a uma pequena região do material e esta restrição faz com que a interação de Coulomb aumente e, conseqüentemente a energia de ligação excitônica também aumenta.

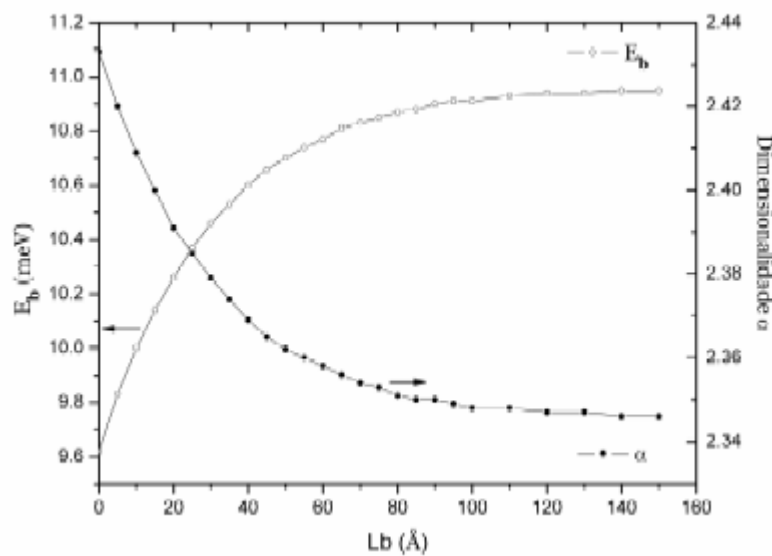


Figura 8.7 – Comportamento da energia de ligação e da dimensionalidade em função da largura da barreira de separação entre os poços simples. Os poço possuem 40Å de largura cada.

8.8 CÁLCULO DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO DAS AMOSTRAS DE POÇOS QUÂNTICOS SIMPLES E DUPLOS

Com os resultados obtidos até o momento, é possível fazer o cálculo teórico da energia de transição das amostras de PQS e PQD. A energia de transição, E_T , entre o primeiro nível de elétron e o primeiro nível de buraco pesado, para poços quânticos simples e duplos é dada, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$E_T = E_G + e_1 + \hbar h_1 - E_b \quad (8.20)$$

$$E_T = E_G + e_{1S} + \hbar h_{1S} - E_b \quad (8.21)$$

A energia de "gap", E_G , do material do poço quântico, *GaAs*, é dada por [47]:

$$E_G = 1519.2 \text{ meV} \quad (8.22)$$

Para o poço quântico simples, as Tabelas (8.1) e (8.3) fornecem os valores dos níveis de energia e_1 e $\hbar h_1$ e da energia de ligação excitônica E_b , respectivamente. Para os poços quânticos duplos, as Tabelas (8.2) e (8.4) fornecem os valores dos níveis de energia e_{1S} e $\hbar h_{1S}$ e da energia de ligação excitônica E_b , respectivamente. A tabela abaixo apresenta os resultados para a energia de transição teórica para os PQS's e PQD's.

Tabela 8.5 – Energia de transição teórica, (E_T), para os PQS's e PQD's.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	E_T (eV)
PQS		80	1.562
PQD	5	40	1.584
PQD	15	40	1.607
PQD	30	40	1.622
PQS		40	1.632

CAPÍTULO 9 – RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados todos os resultados experimentais obtidos para as amostras 2606 e 2607. Primeiramente serão apresentados os resultados da fotoluminescência a baixa temperatura para as duas amostras. Em seguida serão apresentados os resultados da magneto-fotoluminescência, com variação de campo magnético. Na seqüência será descrito o procedimento para a obtenção das curvas do deslocamento diamagnético do pico de emissão das amostras em função do campo magnético aplicado. Por meio do ajuste destas curvas será feita a determinação experimental da energia de ligação excitônica das amostras de poços quânticos simples e duplos. As duas últimas seções se destinam às discussões dos resultados. Primeiramente, será feita uma comparação entre os resultados teóricos, apresentados no capítulo 8, e os resultados experimentais, obtidos por meio do ajuste das curvas do *deslocamento diamagnético*. Por último será feita uma comparação entre a energia de transição teórica, levando em conta a energia de ligação excitônica, apresentada no capítulo 8, e a energia de transição experimental, obtida a partir dos espectros de fotoluminescência a baixas temperaturas.

9.1 RESULTADOS DAS MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA A BAIXA TEMPERATURA

As Figuras 9.1 e 9.2 mostram os espectros de fotoluminescência a baixa temperatura 2606 e 2607 respectivamente. As medidas foram realizadas no Laboratório

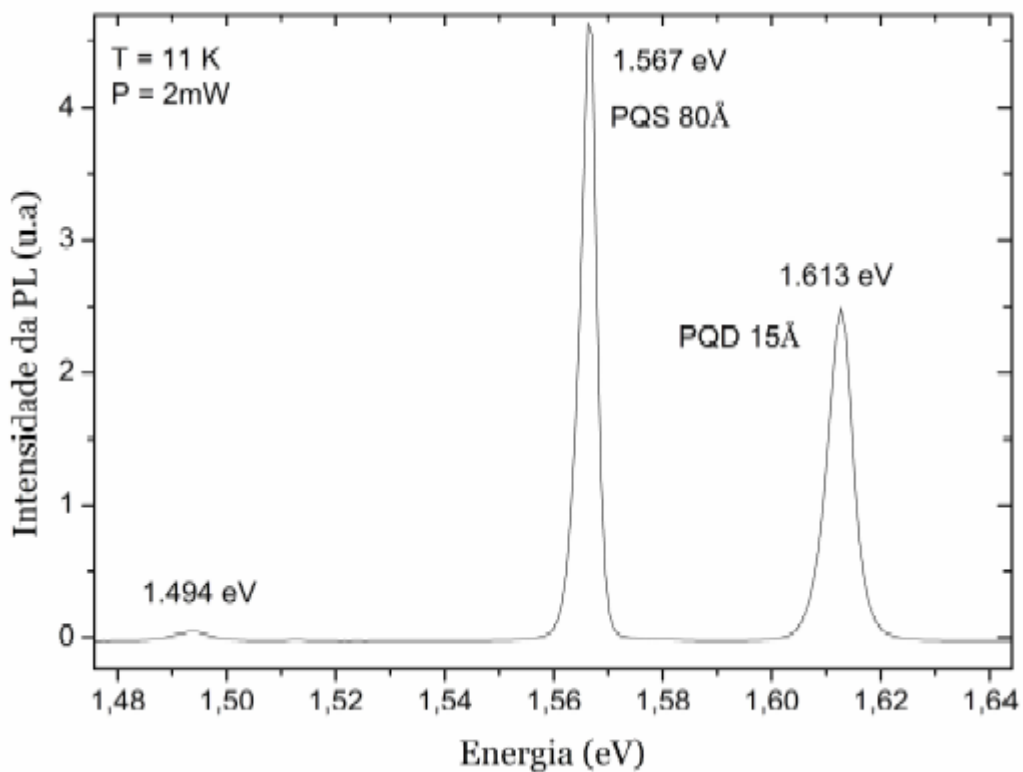


Figura 9.1 – Espectro de PL da amostra 2606 obtido a 11 K e com potencia de excitação de 2 mW.

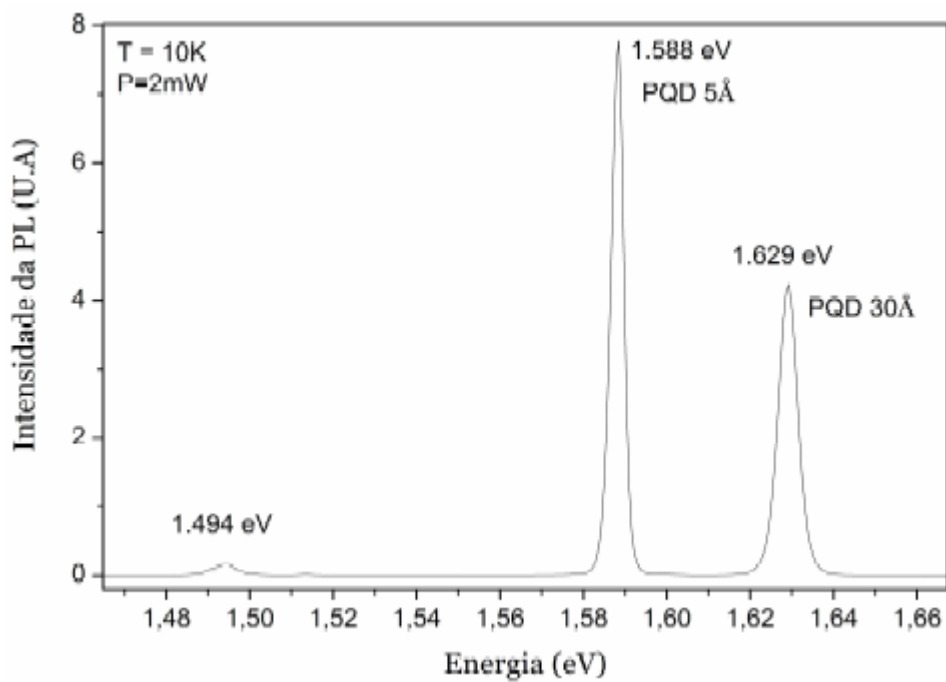


Figura 9.2 – Espectro de PL da amostra 2607 obtido a 10 K e com potencia de excitação de 2 mW.

de Óptica e Optoeletrônica da Universidade Estadual de Londrina.

Com os espectros dessas amostras (Figs. 9.1 e 9.2) e com os cálculos teóricos apresentados no capítulo 8 (Tabela 8.5) é possível identificar as origens das transições ópticas apresentadas pelas duas amostras. Na Figura 9.1, o pico em 1.567 eV é identificado como sendo a energia de transição do poço quântico simples de largura 80 \AA . O pico em 1.613 eV é identificado como sendo a energia de transição do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 15 \AA . Na Figura 9.2, pico em 1.613 eV é identificado como sendo a energia de transição do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 5 \AA , e o pico localizado em 1.629 eV é identificado como sendo a energia de transição do poço quântico duplo simétrico com barreira central de 30 \AA . Uma abordagem mais detalhada será efetuada mais adiante.

9.2 RESULTADOS DAS MEDIDAS DE MAGNETO-FOTOLUMINESCÊNCIA

As Figuras 9.3 e 9.4 mostram os espectro de magneto-fotoluminescência das amostras 2606 e 2607. As medidas foram realizadas no Instituto de Física da Universidade Federal de Minas Gerais. O aparato experimental está descrito no capítulo 7.

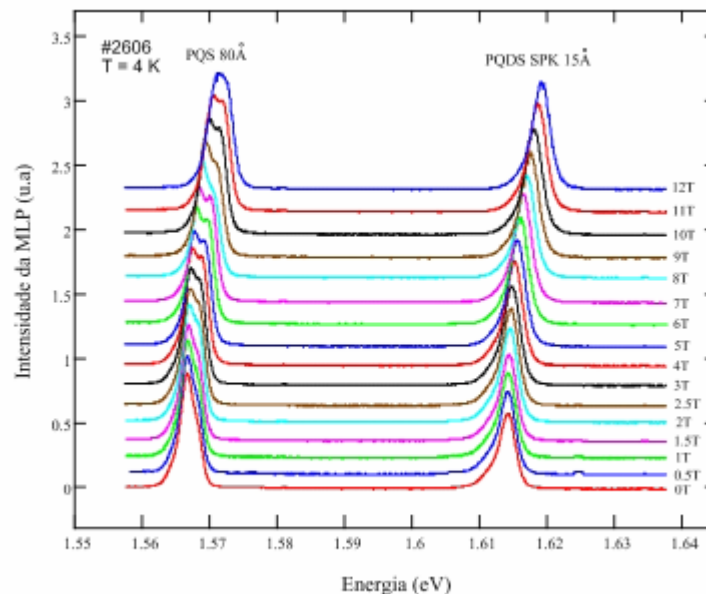


Figura 9.3 – Espectro de MPL obtido à temperatura de 4 K da amostra 2606.

Para a obtenção das curvas de *deslocamento diamagnético* em função do campo magnético aplicado procede-se do seguinte modo: toma-se o espectro obtido sem a aplicação de campo magnético ($0 T$) como sendo o espectro de referência e determina-se a posição

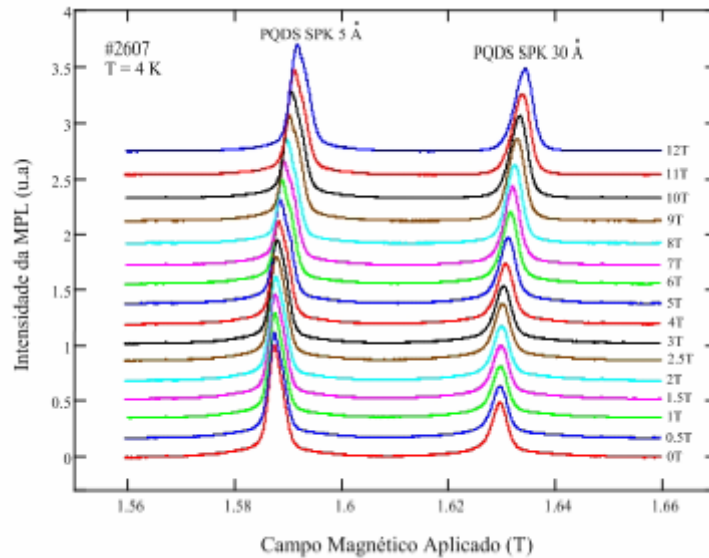


Figura 9.4 – Espectro de MIM. obtido à temperatura de 4 K da amostra 2607.

em energia dos picos deste espectro. Os pontos da curva do deslocamento diamagnético são obtidos subtraindo-se a posição em energia dos espectros obtidos com aplicação de campo magnético da posição em energia do espectro obtido sem aplicação de campo magnético. Dessa forma, o primeiro ponto é o valor da posição em energia do pico do espectro obtido sem campo aplicado, o segundo ponto é obtido subtraindo-se posição em energia do pico do espectro obtido com um campo aplicado de $0.5 T$ da posição em energia do espectro obtido sem aplicação de campo (espectro de referência), e assim sucessivamente. Como cada amostra possui dois poços, ao total serão quatro curvas.

9.3 DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA ENERGIA DE LIGAÇÃO EXCITÔNICA

A determinação experimental da energia de ligação excitônica é feita através do ajustes das curvas do deslocamento diamagnético em função do campo magnético.

As Figuras 9.5 e 9.6 mostram essas curvas para cada uma das amostras. Agregado aos pontos experimentais há uma incerteza estimada de $\pm 0.5 \text{ meV}$, resultante da determinação da posição em energia dos picos nos espectros de MPL.

As curvas do deslocamento diamagnético em função de \mathbf{B} para cada amostra representam o quanto essa energia de emissão está variando com o campo magnético aplicado, em relação a essa mesma energia a campo nulo. Portanto, para obter as equações de ajuste,

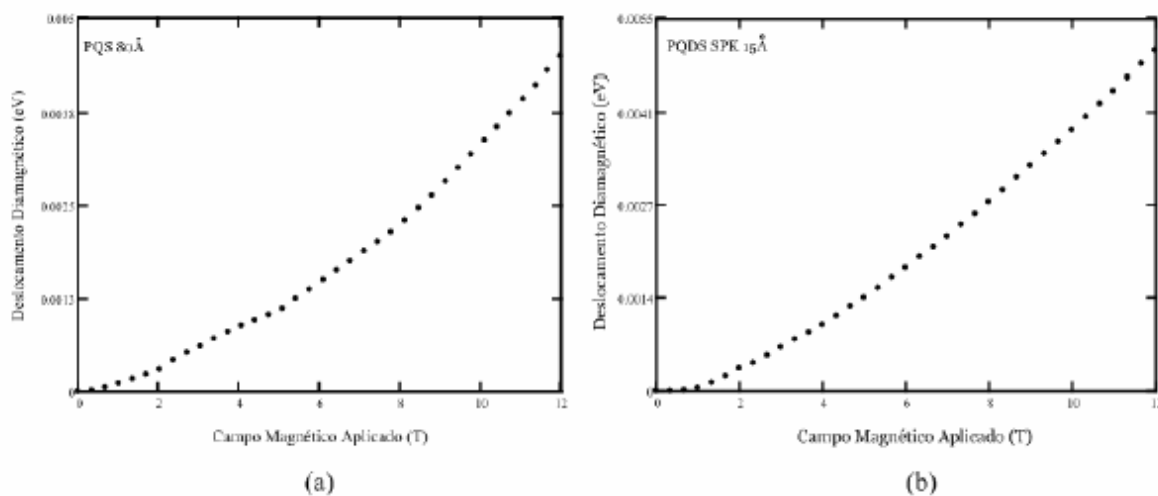


Figura 9.5 – Curva do deslocamento diamagnético para o PQS com espessura de 80Å(a) e para o PQDS com barreira central de 15Å (b).

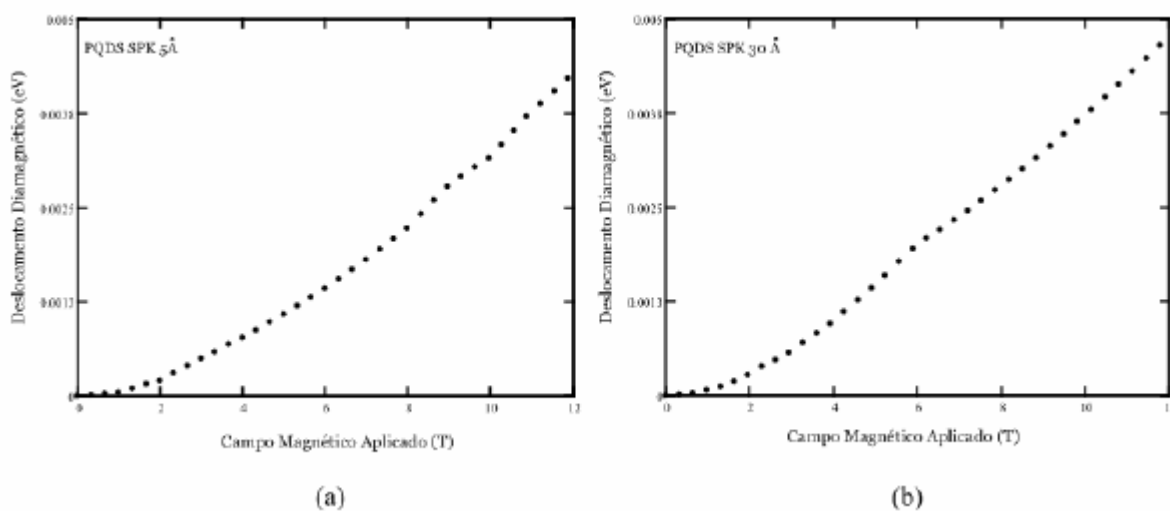


Figura 9.6 – Curva do deslocamento diamagnético para o PQDS com barreira central de 5Å(a) e 30Å(b).

que representam apenas as partes das Eqs. (4.72) e (4.73) que variam com o campo magnético, utiliza-se as seguintes relações:

$$E_{T1}(B) - E_{T1}(B = 0) \quad \text{e} \quad E_{T2}(B) - E_{T2}(B = 0) \quad (9.1)$$

Utilizando as Eqs. (4.72) e (4.73) e a relação acima, as curvas de ajuste para o deslocamento diamagnético podem ser dadas, respectivamente, por:

$$\Delta E_{dia}(B) = \frac{1}{2} \frac{\hbar q}{\mu^*} B - 3 \frac{1}{(\alpha - 1)^2} \left(\frac{\hbar q E_0}{2\mu^*} \right)^{\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} \quad (9.2)$$

e

$$\Delta E_{dia}(B) = \frac{3(\alpha - 1)^4}{2(\alpha+1)\alpha} \frac{\varepsilon_0^2 \varepsilon^2 h^4}{4\pi^2 q^2 (\mu^*)^3} B^2 \quad (9.3)$$

em que $\varepsilon_0 \varepsilon$ é a permissividade do meio, μ é a massa reduzida efetiva do éxeiton, q é a carga e \mathbf{B} é a intensidade do campo magnético aplicado e a é a dimensionalidade do sistema. Através do ajuste das curvas do deslocamento diamagnético pelas equações acima é possível obter experimentalmente a dimensionalidade efetiva do sistema e a massa reduzida efetiva do éxeiton. Utilizando na Eq. (6.37) os valores de α e μ^* , assim obtidos, obtém-se o valor experimental da energia de ligação excitônica, E_b .

Para que o deslocamento diamagnético seja dado em *elétron-volts* (eV), é necessário introduzir um fator multiplicativo para fazer a conversão de unidades. Se h for dado em *elétron-volts x segundos* ($eV \times S$), μ^* for dada em *quilogramas* (Kg), e_0 for dada em *Faraday/metro* ($F.m^{-1}$), q for dada em *Coulomb* (C) e B for dado em *Tesla* (T), esse fator, designado por C , será:

$$C = \frac{1}{(6.241 \times 10^{18} eV)^3} \quad (9.4)$$

Dessa forma, as Eqs. (9.1) e (9.2) podem ser reescritas como:

$$\Delta E_{dia}(B_F) = C \frac{3(\alpha - 1)^4}{2(\alpha+1)\alpha} \frac{\varepsilon_0^2 \varepsilon^2 h^4}{4\pi^2 q^2 (\mu^*)^3} B^2 \quad (9.5)$$

e

$$\Delta E_{dia}(B_I) = \frac{1}{2} \frac{\hbar q}{\mu^*} B - 3 \frac{1}{(\alpha - 1)^2} \left(\frac{\hbar q E_0}{2\mu^*} \right)^{\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} \quad (9.6)$$

em que E_0 é o Rydberg efetivo, dado pela Eq.(2.21):

$$E_0 = \frac{\mu}{m_0 \varepsilon^2} \times R_y \quad (9.7)$$

em que R_y é a constante de Rydberg e vale $R_y = 13.6 \text{ eV}$. O subscrito "F" indexa a curva do deslocamento diamagnético para campos de baixa intensidade, enquanto que o subscrito "I" indexa a curva do deslocamento diamagnético para campos de alta intensidade.

Para fazer o ajuste das curvas do deslocamento diamagnético em função de **B** deve-se utilizar as duas curvas simultaneamente. Para fazer os ajustes adota-se o seguinte procedimento: no mesmo ambiente gráfico em foram graficadas as curvas do deslocamento diamagnético (pontos experimentais) deve-se graficar e ajustar as Eqs. (9.4) e (9.5).

As equações de ajuste (9.5) e (9.6) têm em comum os mesmos α e μ^* ; dessa forma, o ajuste destas equações à curva experimental deve ser feita simultaneamente, e os mesmos valores de α e μ^* devem ser utilizados nas duas equações. Com isso, é possível determinar, para cada amostra, um conjunto de parâmetros α e μ que seja comum aos dois regimes simultaneamente. Obtidos estes valores é possível obter o valor da energia de ligação excitônica, E_b , através da seguinte equação:

$$E_b = \left(\frac{2}{\alpha - 1} \right)^2 E_0^* \quad (9.8)$$

em que α é a dimensionalidade do sistema e E_0^* é o Rydberg efetivo, dado por:

$$E_0^* = \frac{\mu^*}{m_0 (\varepsilon^*)^2} \times R_y \quad (9.9)$$

As Figuras 9.7 e 9.8 mostram os ajustes para cada uma das amostras. Os

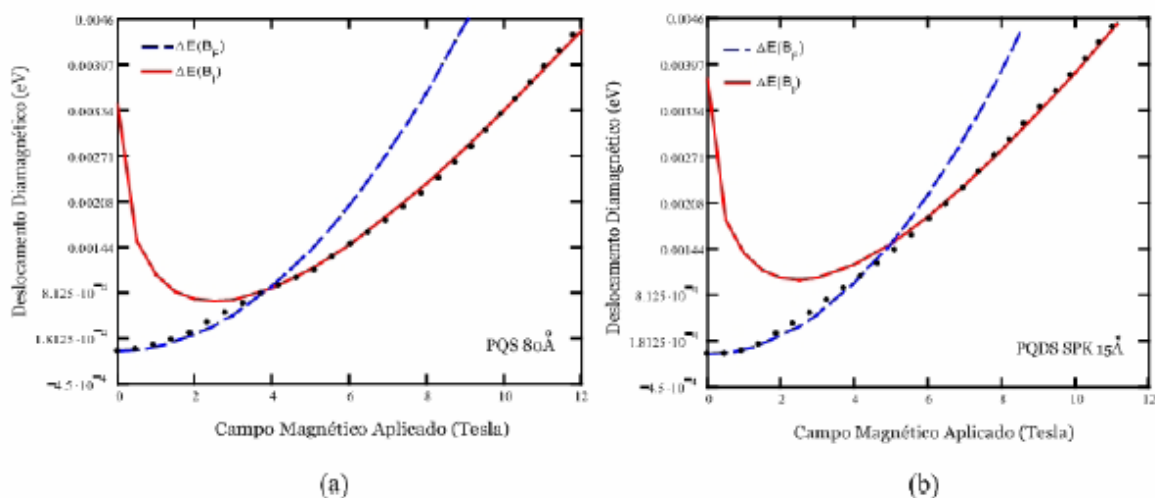


Figura 9.7 – Ajuste das expressões do deslocamento diamagnético aos pontos experimentais, para o PQS de 80Å e para o PQD com barreira central de 5Å de espessura (2606).

parâmetros obtidos por meio dos ajustes das equações de *deslocamento diamagnético* serão apresentados na próxima seção.

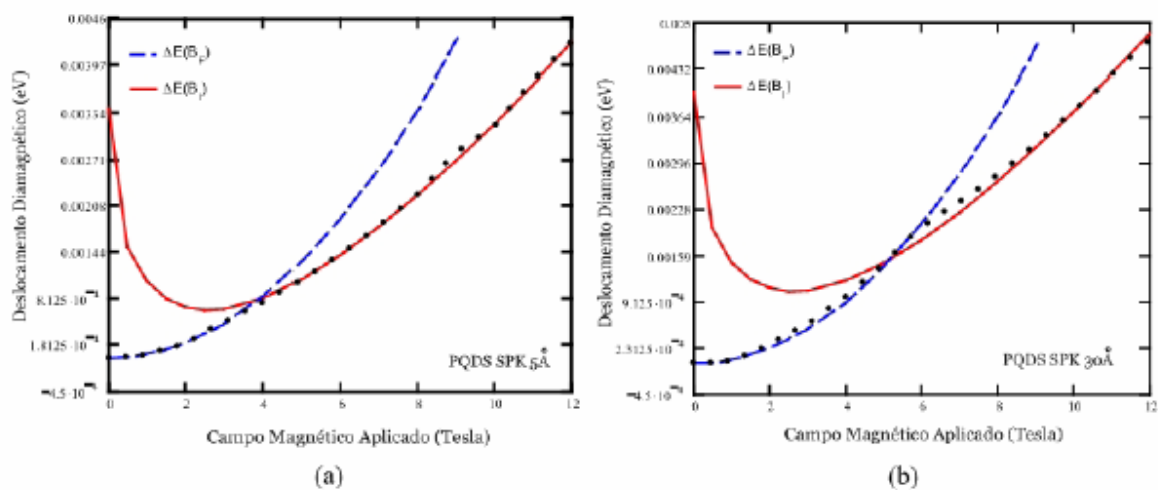


Figura 9.8 – Ajuste das expressões do deslocamento diamagnético aos pontos experimentais, para os PQDSs com barreira central de 5Å e 30Å de espessura (2607).

9.4 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

9.4.1 Fotoluminescência a Baixa Temperatura

As Figuras 9.1 e 9.2 mostram os espectros de PL, à baixa temperatura, das duas amostras. Os dois espectros apresentam dois picos intensos e bem definidos e um pico de baixa intensidade. Utilizando como referência os cálculos teóricos (Tabelas 8.5 e 8.6), os picos intensos podem ser identificados como segue (Tabela 1):

Tabela 9.1 – Identificação dos picos dos espectros de PL (Figs. 9.1 e 9.2) a baixa temperatura.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	$E_{T(EX)}$ (eV)
PQS		80	1.567 ± 0.0005
PQDS	5	40	1.588 ± 0.0005
PQDS	15	40	1.613 ± 0.0005
PQDS	30	40	1.629 ± 0.0005

O pico de mais baixa intensidade, localizado em 1.494 eV , presente nos dois espectros, é identificado como sendo transições associadas à impurezas aceitadoras [47]

9.4.2 Magnetofotoluminescência

Utilizando o espectro obtido a 4 K, sem campo aplicado, e a tabela (9.1), as transições são facilmente identificadas. Nos espectros de MPL. é possível observar um pequeno deslocamento dos picos de energia para regiões de maiores energias à medida que **B** aumenta. Quando o campo magnético é de baixa intensidade, ele apenas perturba os níveis dos portadores [36], deslocando estes para regiões de maiores energias, entretanto não é capaz de modificar a energia de ligação excitônica. Além disso, a variação nos níveis de energia

devido ao campo magnético aplicado varia quadraticamente com \mathbf{B} (Eq. (9.2)). Quando o campo magnético aplicado é intenso, os portadores são promovidos para os níveis de Landau, níveis mais energéticos, e a energia de ligação excitônica passa a apresentar uma dependência com o campo magnético aplicado [36]. Os níveis de Landau variam linearmente com o campo magnético (primeiro termo à direita de (9.3)), já a energia de ligação excitônica varia com a raiz quadrada de B (segundo termo a direita da Eq.(9.3)).

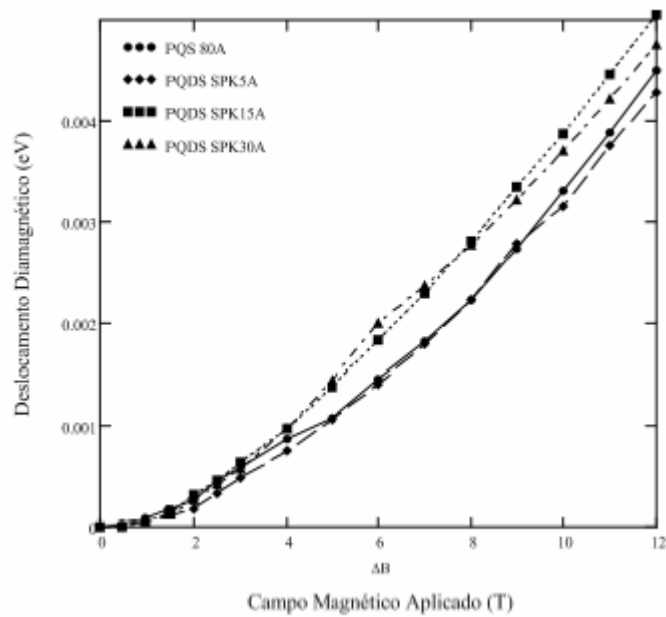


Figura 9.9 – Comparação entre as curvas do deslocamento diamagnético em função do campo magnético aplicado para as amostras de PQS e PQDs.

A Figura (9.9) mostra uma comparação entre o deslocamento diamagnético das amostras estudadas em função do campo magnético aplicado. Nessa figura fica mais evidente os efeitos do campo magnético. Conforme o campo vai aumentando de intensidade, os pontos experimentais (diferença em energia entre os espectros com e sem campo aplicado) tornam-se mais espaçados, implicando em um maior deslocamento diamagnético das amostras. Nas regiões de campos de baixa intensidade a variação é ínfima, e os pontos ficam muito próximos uns dos outros. Ainda na Fig. 9.9 é possível observar que os PQDs com barreiras centrais de 15Å e 30Å de espessura apresentam deslocamentos magnéticos mais intensos. Isso está ligado ao fato de que nesses poços a dimensionalidade do sistema é menor, o que ocasiona uma maior energia de ligação excitônica. Uma análise mais cuidadosa mostra que o segundo termo à direita da Eq.(9.5), que está associado a variação da energia de ligação com o campo magnético, varia inversamente com a dimensionalidade do sistema. Dessa

forma, quanto menor a dimensão do sistema e maior o campo magnético aplicado, maior será a variação de $E_b(B)$. As curvas para o PQS de 80Å e para o PQD com barreira central de 5Å se cruzam varias vezes ao longo da variação do campo; o mesmo acontece para os poços com barreiras centrais de 15Å e 30Å. Nesse caso, há duas questões a serem levadas em conta: analisando os dados das tabelas 8.3 e 8.4, nota-se que a dimensionalidade entre esses sistemas estão muito próximas e, além disso, o erro experimental na determinação dos pontos experimentais é de $\pm 0.5 \text{ meV}$. Assim, pode-se considerar que essas inversões estão dentro do erro experimental.

O ajuste das curvas do deslocamento diamagnético (Figs. 9.7 e 9.8) mostra claramente o comportamento dos sistemas de PQSs e PQDs em função do campo magnético aplicado. Para regiões de campos de baixa intensidade a variação da energia varia quadraticamente com o campo aplicado, evidenciando apenas uma perturbação nos níveis de energia dos portadores. Quando sistema é descrito apenas pela Eq. (9.5), apresentando um comportamento quadrático com B, ele é predominantemente coulombiano. À medida que o campo magnético vai ficando mais intenso, a variação na energia deixa de ser descrita por uma perturbação e passa a ser descrita pela Eq. (9.6), que é uma combinação da energia dos níveis de Landau (primeiro termo à direita da Eq. (9.6)) e da energia de ligação excitônica (segundo termo à direita da Eq. (9.6)). Isso ocorre devido à variação de energia gerada pelo campo magnético ser maior que a energia de ligação excitônica. Porém, embora a energia gerada pelo campo magnético predomine sobre os portadores de carga, ainda existe a presença do potencial coulombiano, responsável por manter o éxciton ligado. À medida que o campo magnético aumenta ainda mais sua intensidade, o potencial de Coulomb já não é suficiente para competir com a energia gerada pelo campo magnético. Assim, o sistema passa a ser descrito, quase que totalmente, pelo primeiro termo à direita de (9.6), que é exclusivamente referente à energia gerada pelo campo magnético. Isso se torna-se claro nas curvas do deslocamento magnético em função do campo aplicado; conforme o campo aumenta a intensidade, os pontos experimentais apresentam, cada vez mais, um comportamento linear. Nesse ponto há uma predominância maior das transições banda-banda e o sistema é *predominantemente magnético*.

Evidentemente, a posição em energia em que o sistema passa de predominantemente coulombiano para predominantemente magnético muda de um sistema para outro. Isto se deve ao fato de que a dimensionalidade muda de um sistema para outro, e esta (dimensionalidade) possui uma forte influência na energia de ligação excitônica, que é,

em grande parte, o que determina em que região de B ocorre a transição entre um sistema coulombiano e um sistema magnético.

A Tabela 9.2 mostra os valores da dimensionalidade e da massa reduzida efetiva, obtidos experimentalmente por meio do ajuste das curvas de deslocamento diamagnético, e os valores de E_b calculados a partir destes parâmetros.

Tabela 9.2 – Valores Experimentais da energia de ligação excitônica, E_b , da dimensionalidade, α , e da, massa reduzida efetiva, μ^* .

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	$\mu^*(m_0)$	α	E_b (meV)
PQ		80	0.055 ± 0.003	2.42 ± 0.02	9.7 ± 1.0
PQD	5	40	0.054 ± 0.003	2.41 ± 0.02	9.7 ± 1.0
PQD	15	40	0.052 ± 0.003	2.38 ± 0.02	9.8 ± 1.0
PQD	30	40	0.052 ± 0.003	2.35 ± 0.02	10.3 ± 1.0

9.4.3 Comparação entre os Resultados Teóricos e Experimentais

A tabela 9.3 mostra uma comparação entre os valores teóricos, obtidos por meio do modelo MLC, e os resultados experimentais da dimensionalidade e da massa efetiva.

Tabela 9.3 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da dimensionalidade e da massa efetiva reduzida.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	$\mu_{(TE)}^*(m_0)$	$\mu_{(EX)}^*(m_0)$	$\alpha_{(TE)}$	$\alpha_{(EX)}$
PQS		80	0.051	0.055	2.41	2.42
PQD	5	40	0.052	0.054	2.40	2.41
PQD	15	40	0.053	0.052	2.39	2.38
PQD	30	40	0.054	0.052	2.37	2.35
PQS		40	0.059		2.35	

Os resultados apresentam boa concordância entre si e, a priori, descrevem bem o comportamento do sistema. O parâmetro α , que descreve a dimensionalidade ou grau de anisotropia do sistema, apresenta o comportamento esperado. Para o PQS de espessura 80Å α apresenta o maior valor, e para o PQS de espessura 40Å α apresenta o menor valor. O valor que α assume nos PQDs fica entre os valores do PQS de 80Å e o de 40Å.

Isso já era esperado, pois, a medida que se introduz a barreira no centro do poço e vai aumentando a espessura da mesma, o sistema aumenta cada vez mais o confinamento dos portadores, até o momento em que a barreira é suficientemente espessa para desacoplar os poços. Nesse caso o sistema é descrito por dois PQSs isolados e com espessuras 40Å cada um. A Tabela acima mostra exatamente este comportamento.

Embora os valores teóricos e experimentais da massa efetiva apresentem uma boa concordância, o comportamento experimental é inverso ao comportamento teórico. A análise da massa efetiva é mais complicada do que a do parâmetro α , pois depende dos seguintes fatores: a penetração da função de onda nas barreiras de potencial, a não parabolicidade da BC, o descasamento entre os valores desta nos materiais do poço e das barreiras e da própria dimensionalidade α . Uma análise direta de μ^* , como feito com o parâmetro α , pode ser um tanto precipitado. Mesmo por que a variação é pequena e está dentro do erro experimental. Além disso, a variação é pequena e deve estar dentro do erro experimental.

Como os resultados experimentais dos parâmetros α e μ^* apresentam boa concordância com os resultados teóricos, é de se esperar que os resultados experimentais da energia de ligação excitônica também apresentem boa concordância e sejam capazes de representar com boa aproximação o sistema. A Tabela 9.4 mostra uma comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de ligação excitônica para os sistemas de poços quânticos simples e duplos.

Tabela 9.4 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de ligação excitônica.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	$E_{b(TE)}$ (meV)	$E_{b(EX)}$ (meV)
PQS		80	9.81	9.73
PQD	5	40	10.11	9.71
PQD	15	40	10.56	9.81
PQD	30	40	11.03	10.34
PQS		40	11.77	

Como esperado, os resultados apresentam boa concordância e, a priori, descrevem bem o comportamento do sistema. A energia de ligação apresenta um comportamento inverso ao da dimensionalidade α , o que era de se esperar, visto que quanto maior a dimensionalidade do sistema menor o confinamento dos portadores e menor é a energia de ligação excitônica. Embora o PQD com barreira central de 5Å apresente uma energia de ligação menor, os resultados estão dentro do erro experimental ($\pm 0.5 \text{ meV}$). Além disso, alguns autores observaram experimentalmente que quando a barreira central é muito estreita a energia de ligação excitônica é menor com relação a energia no poço quântico simples [50, 51]. Novamente observa-se que os valores da energia de ligação nos poços duplos ficam entre os valores desta energia nos PQSs de larguras 80Å e 40Å. Novamente, isso evidencia a grande influência que a dimensionalidade exerce sobre a interação dos portadores entre si, no caso do éxciton, e com o sistema em que se encontram.

A Tabela 9.4 mostra uma comparação entre os resultados teóricos (TE) e experimentais (EX) da energia de transição das amostras de poços quânticos simples e duplos. Os resultados teóricos foram obtidos utilizando-se os valores dos níveis de energia dos PQSs e PQDs (Tabelas 8.1 e 8.2) e a energia de ligação excitônica nesse mesmo poços (Tabelas 8.3 e 8.4), enquanto que os resultados experimentais foram obtidos através dos espectros de PL a baixa temperatura (Figs. 9.1 e 9.2). Essa comparação mostra uma concordância muito boa, e isso é corroborado pelo bom casamento entre os resultados teóricos e experimentais da energia de ligação excitônica e da dimensionalidade do sistema.

Tabela 9.5 – Comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de emissão óptica das amostras estudadas.

Amostra	$L_b(\text{Å})$	$L_w(\text{Å})$	$E_{T(TE)}$ (eV)	$E_{T(EX)}$ (eV)
PQS		80	1.562	1.567
PQDS	5	40	1.584	1.588
PQDS	15	40	1.607	1.613
PQDS	30	40	1.622	1.629
PQS		40	1.631	

CAPÍTULO 10 – CONCLUSÃO

Nesse trabalho foram estudadas, teoricamente e experimentalmente, duas amostras contendo dois poços quânticos cada uma. A primeira (2606) consiste de um sistema de PQS de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com espessura de 80Å e um PQD de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com largura total de 95Å (dois poços de 40Å e barreira central de 15Å). A segunda (2607) consiste de um PQD de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com largura total de 85Å (dois poços de 40Å e barreira central de 5Å) e um PQD de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com largura total de 110Å (dois poços de 40Å e barreira central de 30Å). Foi analisado também, apenas teoricamente, um sistema de PQS de $Al_{0.25}Ga_{0.75}As/GaAs$ com espessura de 40Å . Esse último poço foi estudado para se ter os parâmetros na situação ideal de barreira central infinita, visto que quando a barreira central é muito espessa o poço duplo pode ser considerado como sendo composto por dois PQSs com 40Å de espessura cada.

A parte teórica do trabalho consistiu no cálculo dos níveis de energia dos portadores, da energia de ligação excitônica para o estado fundamental do éxciton, da dimensionalidade ou grau de anisotropia e da energia de transição. Para o PQS os níveis de energia foram calculados em função da largura do poço, já para os PQDs os níveis de energia foram calculados em função da largura da barreira central. A energia de ligação excitônica e a dimensionalidade, tanto para o PQS quanto para os PQD, foram calculadas em função da largura do poço.

Os resultados encontram-se nas Tabelas 8.1 a 8.6. Os níveis de energia dos PQSs e PQDs foram obtidos resolvendo-se numericamente as Eqs. (6.2) e (6.39), respectivamente. A energia de ligação excitônica e a dimensionalidade foram obtidos utilizando o modelo *MLC* [26, 1]. A energia de transição foi determinada utilizando os resultados teóricos anteriores e a relação (8.24).

Na parte experimental do trabalho foram realizadas medidas de fotoluminescência a baixa temperatura (11 K para a amostra 2606) e (10 K para a amostra 2607) e mag-netofotoluminescência a baixa temperatura com aplicação de campo magnético (4 K) e B variando de 0 T até 12 T para ambas as amostras). Os espectros são mostrados nas Figuras 9.1 a 9.4.

No espectro de PL a baixa temperatura da amostra 2606 dois picos intensos, localizados em 1.567 eV e 1.613 eV , foram observados. Esses picos foram identificados como

sendo transições excitônicas referentes ao primeiro nível de buraco pesado dos sistemas de PQS com 80\AA de espessura e do PQD com 95\AA de espessura (barreira central de 15\AA), respectivamente.

No espectro de PL a baixa temperatura da amostra 2607 dois picos intensos, localizados em 1.588 eV e 1.629 eV , foram observados. Esses picos foram identificados como sendo transições excitônicas referentes ao primeiro nível de buraco pesado dos sistemas de PQDS com 85\AA de espessura (barreira central de 5\AA) e 110\AA de espessura (barreira central de 30\AA), respectivamente.

Nos espectros das amostras 2606 e 2607 ainda observa-se um pico de menor intensidade, localizado em 1.494 eV que foi associado com sendo transições associadas a impurezas aceitadoras no *AlGaAs* volumétrico (“bulk”).

Nos espectros de MPL. (Figs. 9.3 e 9.4) e nas curvas de *deslocamento diamagnético* (Figs. 9.5 e 9.6) observou-se o deslocamento da posição em energia dos espectros para regiões de maiores energias, efeito este gerado pelo campo magnético aplicado nas amostras. Nas regiões em que o campo aplicado é de baixa intensidade os pontos apresentam um comportamento quadrático, indicando que o campo está apenas perturbando os níveis de energia; nessa situação o sistema ainda é predominantemente coulombiano. Já em regiões em que o campo magnético aplicado é de alta intensidade a dependência com o campo magnético muda, pois ocorre a formação dos níveis de Landau (níveis mais energéticos) e, além disso, a energia de ligação excitônica, que não varia quando o campo é de baixa intensidade, passa a apresentar uma dependência com o campo magnético. Nessa situação o sistema é predominantemente magnético.

As Equações (9.4) e (9.5), que descrevem as curvas do deslocamento diamagnético, ajustaram bem os dados experimentais (Figs. 9.7 e 9.8). Através destes ajustes obteve-se, experimentalmente, a dimensionalidade a e a massa reduzida efetiva μ^* e, a partir da substituição destes parâmetros na Eq. (9.7), obteve-se a energia de ligação excitônica dos sistemas de PQS e PQDs. Os resultados são mostrados na Tabela 9.2.

As Tabelas 9.3 e 9.4 mostram uma comparação entre os dados experimentais e teóricos. Tanto os resultados da dimensionalidade efetiva e da energia de ligação excitônica mostram boa concordância entre si, e descrevem com boa aproximação o comportamento do sistema. O valor da energia de ligação no PQS de 80\AA (9.7 meV) é praticamente a mesma que a do poço quântico duplo com barreira central de 5\AA (9.7 meV). Além disso, o valor da dimensionalidade e a massa reduzida efetiva destes dois sistemas

encontram-se muito próximas, o que sugere efetivamente a proximidade nos valores da energia de ligação nestes sistemas.

Outro resultado relevante é o fato dos parâmetros α e E_b , para os poços quânticos duplos, variarem entre os valores destes parâmetros nos poços quânticos simples com 80 Å e 40Å, mostrando que os poços duplos apresentam propriedades compatíveis com as do PQS.

A massa efetiva possui um peso maior no ajuste das curvas de deslocamento diamagnético do que a dimensionalidade α . E_b , embora os valores teóricos e experimentais da massa reduzida efetiva (μ^*) estejam bem próximos, estes não apresentaram o comportamento obtido teoricamente. No entanto, é importante apontar que esse parâmetro depende de um número maior de fatores, e seria precipitado fazer qualquer análise a respeito dos valores apresentados na Tabela 9.3 sem uma investigação mais profunda a respeito do seu comportamento em poços quânticos simples e duplos.

A boa concordância entre os resultados teóricos e experimentais, mostrados na Tabelas 9.3 e 9.4, mostra que o modelo de cálculo *MLC*, apesar de ser um modelo simples, descreve com boa precisão o comportamento dos portadores nos sistemas de PQS e PQD, e é uma ferramenta poderosa na obtenção de parâmetros em sistemas de poços quânticos simples e duplos.

Por fim, a Tabela 9.5 mostra a comparação entre os resultados teóricos e experimentais da energia de transição das amostras estudadas. Os resultados apresentam boa concordância, o que significa que os resultados teóricos da energia de ligação excitônica e os níveis de energia dos portadores fornecem uma boa descrição do comportamento dos portadores nos sistemas de PQS e PQDs, o que corrobora mais uma vez a grande eficiência do modelo *MLC*.

Para a continuação do trabalho, seria interessante fazer um estudo detalhado das funções de onda dos portadores e do éxciton, com e sem campo magnético aplicado. Por meio do estudo das funções de onda dos portadores, com e sem campo magnético aplicado, é possível obter mais informações sobre os efeitos que o campo magnético exerce sobre os portadores e sobre o éxciton. Além disso, a penetração das funções de onda nas barreiras de potencial fornece informações importantes sobre o comportamento dos portadores no sistema.

Um estudo mais profundo nas relações da massa efetiva, e dos vários fatores que a influenciam, seria de grande auxílio na determinação do seu comportamento, visto que esta tem um peso muito grande no ajuste das curvas de magnetofotoluminescência.

Outro trabalho interessante seria o estudo da fotoluminescência dessas amostras sob aplicação de campo elétrico na direção de crescimento, o que permitiria estudar a formação de éxcitons indiretos, onde os elétrons ficam confinados em um poço do PQD e os buracos ficam confinados no outro poço.

REFERÊNCIAS

- [1] H. Mathieu, P. Lefebvre and P. Christol, *Phys. Rev. B* 46, 4092 (1992).
- [2] L. L. Chang. K. Ploog. eds., *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*. NATO Advanced Science Institute Series, Nijohoff, Dordrecht (1985).
- [3] E. C. Valadares, M. B. V. Moreira, J. C. Bezerra, I. F. L. Dias., *Super-Redes -Harmonia das Bandas Cristalinas*, *Ciência Hoje* 6 (35): 45, 1987.
- [4] K. Von Klitzing, M. Pepper, and G. Dorda., *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).
- [5] D. C. Tsui, A. C. Gossard., *Appl. Phys. Lett.* 38, 550 (1981).
- [6] D. C. Tsui, H. L. Stoner, and A. C. Gossard., *Phys. Rev. Lett.* 48, 1559 (1982).
- [7] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Domen, A. C. Gossard, W. Wiehmann, T. H. Wood, and C. A. Burrus, *Phys. Rev. Lett.* 53, 2173 (1984).
- [8] T. Mozume, H. Yoshida, A. Neogi, and M. Kudo., *Jpn. J. Appl. Phys.* 3_8_, 1286 (1999).
- [9] S. F. Yoon, Y. B. Miao, K. Radhakrishnan, and S. Swaminathan, *Thin Solid Films.* 266, 302 (1995).
- [10] A. Z. Li, Y. Zhao, Y. L. Zheng, G. T. Chen, G. P. Ru, W. Z. Shen, and J. Q. Zhong., *Journal of Crystal Growth.* 175, 873 (1997).
- [11] H. W. Dinges, H. Hillmer, H. Burkhard, R. Lôseh, H. Nickel, and W. Schlapp., *Surface Science.* 307, 1057 (1994).
- [12] S. Chelles, "*Estude de faisabilité de modulateurs à electronabsorbants en onde guidée insensibles à la polarization*", Thèse de Doctorat Université Paris 6, 1995.
- [13] G. Sek, K. Ryczko, M. Kubisa, J. Misiewicz, M. Bayer, T. Wang, J. Koeth, and A. Forehel, *Thin Solid Films.* 364, 220 (2000).

- [14] D. M. T. Kuo, Y. C. Chang, *Chin. J. Phys.* 39, 75 (2001).
- [15] X. G. P. Grish, "*Terahertz plasmon modes in grating coupled double quantum well field effect transistors*", Doctorate dissertation-University of California, Santa Barbara, 2002.
- [16] F. Devaux, J. C. Harmand, I. F. L. Dias, T. Guettler, O. Krebs, and P. Voisin., *Electronics Letters*. 33, 161 (1997).
- [17] A. G. Choon, H. E. Jackson, P. Chen, A. J. Steckl, V. Gupta, and J. T. Boyd., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 240, 697 (1992).
- [18] Growth and Characterisation of Semiconductors, Edited by R. A. Stradling and P. C. Klipstein, *Adam Hilger Public*, p. 135 (1991).
- [19] R. C. Miller, A. Gossard, G. Sanders, Y. Chang, and J. Schulman., *Phys. Rev. B*. 32, 8452 (1985).
- [20] D. E. Aspnes, in *Handbook on Semiconductors*, Vol. 2, edited by T. S. Mass (North Hallond, New York, 1980), p. 109.
- [21] M. Cardona, in *Modulation Spectroscopy* (Academic, New York, 1969).
- [22] S. A. Lourenço., "*Variação térmica das transições excitônicas na liga ternária AlGaAs e em poços quânticos de AlGaAs/GaAs.*" Tese de mestrado-Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, 2000.
- [23] J. Frenkel, *Phys. Rev.* 17, 17 (1931).
- [24] G. H. Wannier, *Phys. Rev* 52, 191 (1937).
- [25] N. F. Mott and M. J. Littleton, *Trans. Faraday Soc.* 34, 500 (1938).
- [26] Q. X. Zhao, B. Monemar, P. O. Holtz, M. Willander, B. O. Fimland and K. Johannessen, *Phys. Rev B* 50, 4476 (1994).
- [27] D. C. Elias., "*Excitons em poços quânticos acoplados de InGaAs/InGaAlAs.*" Tese de mestrado-Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, 2005.

- [28] M. Valadares/'*Magneto-éxcitons em super-redes semieondutoras de InGaAs/InAl As.*" Tese de mestrado-Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, 2004.
- [29] L. L. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1968), 3rd ed.
- [30] X. F. He, *Phys. Rev. B* 43, 2063 (1991).
- [31] F. H. Stillinger, *J. Math. Phys.* 18, 1224 (1977).
- [32] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Hardcover, 1994), 2nd ed.
- [33] L. Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development* (WorldScientific, Singapore, 1998), 2nd ed.
- [34] S. N. Walck and T. L. Reinecke, *Phys. Rev B* 57, 9088 (1998).
- [35] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, *Phys. Rev. B* 48_, 8848 (1993).
- [36] O. Jaschinski, M. Vergohl, J. Schoenes, A. Schlachetzki and P. Bonsch, *Phys. Rev. B* 57, 13086 (1998).
- [37] D.J. Mowbray, J. Singleton, M. S. Skolnick, N. J. Pulsford, S. J. Bass, L. L. Taylor, R. J. Nicholas and W. Hayes, *Superlattices Microstruct* 3, 471 (1987).
- [38] O. Akimoto and H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* 22. 181 (1967).
- [39] D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon and K. Woodbridge, *Phys. Rev. B* 31. 4002 (1986)
- [40] A. Thilangan, *Physica B* 262, 390-398 (1999).
- [41] C. Weisbuch, *Applications of Multiquantum Wells, Selective Doping and Superlattices, in Semiconductors and Semimetals* (Academic Press, 1987), 2nd ed.

- [42] T. Westgaard, Q. X. Zhao, B. O. Fimland, K. Johannessen and L. Johnsen, *Phys. Rev B* 45, 1784 (1992)
- [43] U. Ekemberg, *Phys. Rev. B* 40, 7714 (1989).
- [44] M. Braun and U. Rossler, *J. Phys. C* 18, 3365 (1985).
- [45] L. C. Andreani and A. Pasquarello, *Phys. Rev. B* 42, 8928 (1990). [46] A. Baldereschi and N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* 3, 439 (1971). [47] L. Pavesi and M. Guzzi., *J. Appl. Phys.* 75, 4779 (1994). [48] R. Dingle., *Festkorperprobleme* XV, 21 (1975)
- [49] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Physics* (Les Ulis Cedex, 1988), 1nd ed.
- [50] M. Bayer, V. B. Timofeev, F. Faller, T. Gutbrod and A. Forchel, *Phys. Rev. B* 54, 8799 (1996).
- [51] F. Vera and Z. Barticevic, *J. Appl. Phys. Underline* 83, 7720 (1998).