

1994/07
5235

Tese de Doutorado

**EFEITOS DO CAMPO ELÉTRICO SOBRE AS
PROPRIEDADES DE IMPUREZAS RASAS EM
POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-(Ga,Al)As**

Rosana Bulos Santiago

530.41

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

1994



DEDICATÓRIA

***Aos meus filhos Iana e Dudu
e ao meu marido Lula.***

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores Prof. José d'Albuquerque e Castro e Prof. Luiz Eduardo Oliveira por terem conduzido este trabalho com firmeza e objetividade me mostrando os caminhos da pesquisa. E especialmente pela compreensão e confiança que tiveram comigo quando por duas vezes tive que fazer uma breve parada no curso de doutoramento para ser mãe.

Ao Prof. Amós Troper pelo incentivo científico e apoio no CBPF.

Ao Lula pelas inúmeras discussões, por tudo que me ajudou e por fazer parte da minha vida.

À Deus por ter me concedido esta alegria.

Parte do trabalho apresentado nesta tese já foi publicado:

- *SPIE's Quantum Well and Supperlattice Physics, Somerset, New Jersey (1992), Editors: G. H. Dohler and E. S. Koteles, vol. 1675, 151-160 (1992).*
- *Phys. Stat. Sol. (b) 169, K25 (1992).*
- *Phys. Rev. B 46, 4041 (1992).*
- *Phys. Rev. B 48, 4498 (1993).*
- *Braz. J. Phys. 24, 180 (1994).*

RESUMO

Neste trabalho estudamos os efeitos de campo elétrico sobre as propriedades dos estados de impurezas rasas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As. O campo elétrico é aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura. Em nossos cálculos adotamos o método variacional na aproximação da massa efetiva. São apresentadas as energias de ligação de impurezas doadoras em função da sua posição no poço para diferentes valores de campo elétrico aplicado. Apresentamos resultados teóricos para os espectros de absorção ótica associados às impurezas rasas e também os espectros de fotoluminescência relacionados à recombinação elétron-aceitador, para diferentes valores de campo elétrico e perfis de dopagem. Por fim, analisamos o cálculo do estado fundamental de impurezas rasas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As considerando o Hamiltoniano do problema diagonalizado numa base de estados tipo $|1s\rangle$ e $|2s\rangle$ hidrogenóides multiplicados pelo estado fundamental do poço quântico sem o potencial da impureza.

ABSTRACT

The effects of applied longitudinal electric field on the properties of shallow impurities states in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells are studied in this work. Our calculations are based on the variational method and effective-mass approximation. We show the donors binding energies as functions of impurity position in the well for different applied electric fields. We present optical absorption theoretical results associated with shallow impurities and acceptor-related photoluminescence spectra for different electric field intensities and doping profiles. We also discuss the ground state of shallow impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells by considering the diagonalization of the hamiltonian in a basis consisting of products of $|1s\rangle$ and $|2s\rangle$ like hydrogenic states by the ground-state wave function of the quantum well without taking into account the impurity potencial.

SUMÁRIO

1	<i>Introdução</i>	1
2	<i>Cálculo das Energias de Ligação de Impurezas Doadoras em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com Campo Elétrico Aplicado.</i>	
2.1	<i>Introdução</i>	16
2.2	<i>O Hamiltoniano</i>	18
2.3	<i>Cálculo da Energia de Ligação</i>	19
2.4	<i>Resultados e Discussão</i>	23
3	<i>Efeitos do Campo Elétrico sobre o Espectro de Absorção Ótica de Impurezas Rasas em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As.</i>	
3.1	<i>Introdução</i>	31
3.2	<i>Absorção Ótica Associada Impurezas em Poços Quânticos Submetidos Campo Elétrico Externo</i>	34
3.3	<i>Resultados e Discussão</i>	40
4	<i>Estudo da Fotoluminescência associada aos Aceitadores Rasos em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com Campo Elétrico Aplicado.</i>	
4.1	<i>Introdução</i>	54
4.2	<i>Cálculo do Espectro de Fotoluminescência</i>	56
3.3	<i>Resultados e Discussão</i>	58

5 Análise do Estado Fundamental de Impurezas Rasas em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As.

5.1 Introdução	69
5.2 Cálculo da Energia	70
3.3 Resultados e Discussão	73

6 Conclusões	79
---------------------------	-----------

APÊNDICES

A - Unidades Efetivas.....	84
B - Solução Exata para o Problema do Poço Quântico Submetido ao Campo Elétrico Externo.....	85
C - Cálculo da Energia de Ligação de Impurezas Rasas em Poços Quânticos com Campo Elétrico Aplicado.....	88

REFERÊNCIAS.....	92
-------------------------	-----------

CAPÍTULO I

Introdução

O contínuo avanço nas técnicas de crescimento de cristais, tais como epitaxia por feixe molecular⁽¹⁾ (MBE)* , deposição por vapor químico de compostos organo-metálicos⁽²⁾ (MOCVD)# e mais recentemente epitaxia por feixe químico (CBE)& , permitiu gerar uma nova classe de sólidos, as chamadas "heteroestruturas semicondutoras". Estas heteroestruturas foram concebidas nos primórdios dos anos setenta por L. Esaki e R. Tsu⁽³⁾, porém somente alguns anos mais tarde, através da técnica de MBE, foi possível torná-las realidade⁽⁴⁾. Esta nova classe de materiais é formada por diferentes semicondutores ou por ligas semicondutoras dispostas alternadamente em camadas ultra-finas. Cada camada tem espessura da ordem de dez a cem átomos e os semicondutores são escolhidos de forma a terem diferentes *gaps* de energia (bandas proibidas de energia). Este tipo de disposição dá origem a um perfil de potencial, constituído por poços e barreiras de potenciais, ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura (veja figura 1.1). Três configurações básicas são geralmente usadas: uma heterojunção simples separada por uma

* *Molecular Beam Epitaxy - MBE*

Metal-Organic Chemical Vapor Deposition - MOCVD

& *Chemical Beam Epitaxy - CBE*

interface, um único poço quântico sandwichado por duas barreiras, e uma super-rede que é formada por uma série de poços e barreiras periodicamente espaçadas.

Estas heteroestruturas podem apresentar fenômenos quânticos, no caso em que a largura dos poços forem compatíveis ao comprimento de onda dos elétrons, que não somente mudam o esquema de energia como também alteram as densidades de estados e restringem o movimento dos elétrons dentro das camadas, diminuindo assim, a dimensionalidade do sistema de elétrons para menor do que três. Este fato, juntamente com as modificações introduzidas por impurezas no potencial das heteroestruturas dão origem a novas propriedades ópticas, magnéticas e de transportes. Estas propriedades, de certa forma, podem ser monitoradas, pois atualmente, durante o processo de fabricação, pode-se controlar com precisão a composição e a largura das camadas.

Associado ao efeito de quantização de energia está a dimensionalidade dos elétrons nas heteroestruturas^(5,6). Nos poços quânticos os elétrons só podem mover-se livremente na direção paralela ao plano das camadas e perpendicularmente seu movimento é quantizado. Estes sistemas são ditos "quasi-bidimensionais". Atualmente com o auxílio das técnicas de fotolitografia⁽⁷⁾ e desbaste químico, já são construídos sistemas nos quais elétrons ficam confinados em linhas e até mesmo em pontos, são os chamados fios de poços quânticos⁽⁸⁾ (QWW)^o e pontos de poços quânticos^(9,10) (QWD)^s, respectivamente.

Estes sólidos, estruturados artificialmente, são de grande importância tecnológica⁽¹¹⁻¹⁶⁾ pois apresentam grande eficiência nos processos de absorção e emissão de luz, tornando-se um meio ideal para a construção de dispositivos opto-eletrônicos, ou seja, transformação de sinais elétricos em sinais ópticos e vice-versa, são as bases dos diodos à laser comumente encontrados em toca discos à laser ou em receptores sensíveis à microondas que recebem sinais de satélites artificiais.

^o *Quantum Well Wires - QWW*

^s *Quantum Well Dots - QWD*

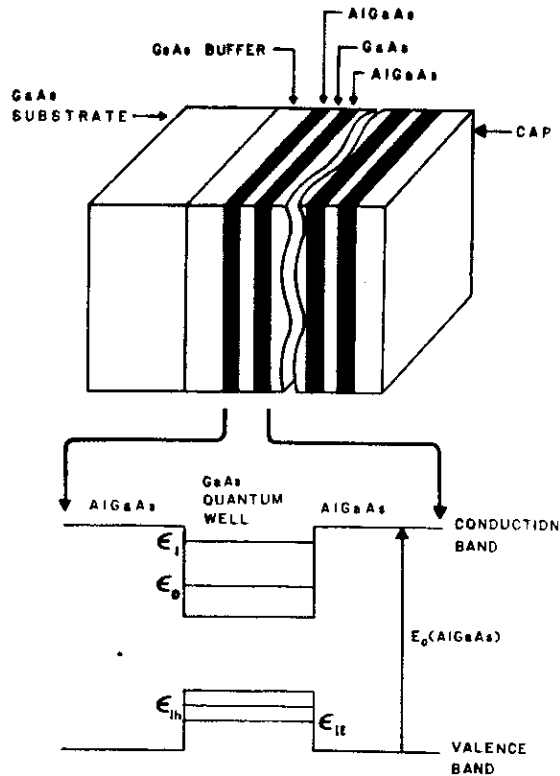


Figura 1.1

Representação esquemática de uma amostra de Poços Quânticos Múltiplos.

As sub-bandas de condução e de valência do GaAs estão indicadas: ϵ_0 representa o fundo da primeira sub-banda de condução e ϵ_{lh} e ϵ_{lh} representam o topo das primeiras sub-bandas de valência associadas ao buraco leve e pesado, respectivamente.

Do ponto de vista científico, o interesse e a curiosidade surgem mesmo antes da elaboração destes sistemas, pois haviam muitas previsões acerca de novos efeitos, como por exemplo: o efeito Hall⁽¹⁷⁻²⁰⁾, a exótica resistividade diferencial negativa⁽²¹⁻²²⁾, que surge com um paradoxal decréscimo da corrente elétrica com o aumento da voltagem aplicada, como também o efeito da absorção óptica⁽⁴⁻²³⁾ em super-redes que ocorre caso a energia dos fótons for igual ou superior ao limiar determinado não pelo *gap* de energia de um dos semicondutores, mais sim pelo *gap* efetivo, ou seja, a diferença de energia entre a primeira sub-banda de condução e a mais energética banda de valência. A condutividade de uma super-rede dopada é maior do que a de um semicondutor uniforme com a mesma concentração de portadores⁽²²⁻²³⁾.

Os estudos em heteroestruturas começaram com as interfaces de GaAs-(Ga,Al)As e este permaneceu como sistema dominante e mais estudado ao longo do desenvolvimento desta área.

Tanto o GaAs quanto o AlAs são compostos por elementos dos grupos III e V da Tabela Periódica. Normalmente estes compostos cristalizam-se em estruturas zinblenda (figura 1.2) que consiste em duas redes do tipo cúbica de face centrada (fcc) interpenetradas, deslocadas uma em relação a outra de um quarto da diagonal principal do cubo.

O GaAs é um material de *gap* direto enquanto o AlAs é um material de *gap* indireto. A diferença entre os parâmetros de rede destes compostos é mínima (menos que 0.15%) possibilitando assim a formação da liga de Ga_{1-x}Al_xAs, onde x é a concentração do Al.

O Ga_{1-x}Al_xAs é uma liga do tipo ternária substitucional, ou seja, os átomos de Al e Ga dividem entre si as posições de uma das sub-redes fcc (fig.1.2) enquanto a outra continua sendo ocupada somente pelos átomos de As. Para concentrações de $x_{Al} \leq 0.4$, o Ga_{1-x}Al_xAs possui *gap* direto no centro da zona de Brillouin (ponto Γ), e o parâmetro de rede é dado por $a(x) = 5.6533 + 0.0078x$ ⁽³⁰⁾. Assim, para esta faixa de concentração, o GaAs

e o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ possuem parâmetros de rede muito próximos entre si, permitindo um bom ajuste nas interfaces das heteroestruturas formadas por $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$.

Sabe-se que o *gap* de energia do $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ é maior do que o do GaAs. Quando estes dois materiais se juntam há uma brusca descontinuidade dos *gaps* na interface. Geralmente esta descontinuidade é compartilhada entre as bandas de valência e de condução. Há evidências experimentais⁽³¹⁻³²⁾ que indicam que aproximadamente 60% da diferença da energia entre os *gaps* dos dois materiais ocorre na altura da banda de condução.

O entendimento detalhado das propriedades das impurezas nas heteroestruturas semicondutoras são de importância fundamental, pois estas contribuem de forma significativa nas propriedades ópticas e eletrônicas destes sistemas. As impurezas contribuem com portadores de carga para a condução, atuam como centro espalhadores limitando a mobilidade e participam nos processos radiativos e não-radiativos na recombinação de elétrons com buracos.

Quando introduzimos impurezas em um cristal perfeito, estamos quebrando com a periodicidade deste e criando imperfeições na rede. Aqui nos limitaremos ao estudo das impurezas do tipo rasas; que se caracterizam por possuírem apenas um elétron de valência, que são comumente conhecidas como impurezas hidrogenóides. Numa visão pictórica podemos imaginar que estas impurezas se comportam como um átomo de hidrogênio. Dentro desta classe, nos restringiremos as impurezas substitucionais, isto é, átomos de impurezas que ocupam o lugar que normalmente o átomo do material hospedeiro ocuparia.

Quando se dopa um material semiconductor são criados estados localizados no *gap* de energia, antes inexistentes. Uma consequência importante destes estados localizados é que a impureza pode existir em vários estados de carga dependendo se estes estados localizados estão ocupados ou não. Desta forma definimos impurezas doadoras e aceitadoras da seguinte forma: estados de carga positiva de uma impureza são definidos como estados aceitadores, e estados de carga negativo são definidos como estados

doadores. Quando um semiconductor é dopado com aceitadores dizemos que este é um semiconductor tipo-p , e se for dopado com impurezas doadoras dizemos que é um semiconductor tipo-n. Um caráter interessante nos compostos semicondutores, como é o caso do GaAs, é que um átomo de uma impureza tanto pode ser doador como aceitador dependendo qual átomo hospedeiro será substituído. À temperatura ambiente, quase todas as impurezas estão ionizadas e contribuem para a condutividade, uma vez que as suas energias de ionização são comparáveis com $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann). A maioria dos doadores e aceitadores podem ser introduzidos em concentrações arbitrárias, em torno de 10^{20} (cm^{-3}), e de maneira não uniforme por diversas técnicas precisas e controladas. A partir destas diferenças em concentração de impurezas pode-se criar uma série de dispositivos, tais como: a junção p-n, junção p-n-p que forma o transistor, etc.

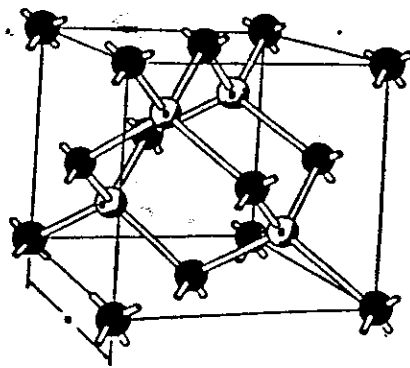


Figura 1.2

Estrutura Zincblenda (ref.34).

As impurezas rasas quando são introduzidas nas super-redes comportam-se diferentemente do que no *bulk* (no interior do material) de um semiconductor. Da mesma forma que no *bulk*, estas criam níveis de energias localizados no *gap*, mas agora dão

origem a chamada "banda de impurezas". Os níveis de energias que geram esta banda estão associados às diferentes posições das impurezas dentro do poço quântico⁽³³⁾. A energia de ligação é definida como sendo a energia necessária para doar o elétron (buraco) da impureza doadora (aceitadora) para os níveis de energia da banda de condução (valência) do poço; esta energia é função da posição da impureza no poço quântico.

De forma a investigar as propriedades eletrônicas e de impurezas dos poços quânticos utilizaremos o método da função de onda envelope⁽³⁴⁾ na aproximação de massa efetiva⁽³⁴⁻³⁵⁾. Outros métodos são também empregados para o cálculo das bandas energéticas das heteroestruturas, tais como: Método de Combinação Linear de Orbitais Atômicos⁽³⁶⁾ (LCAO), Tight Binding⁽³⁷⁻³⁸⁾, Pseudo Potenciais⁽³⁹⁻⁴⁰⁾, entre outros; todos estes métodos levam em conta a estrutura microscópica do sistema. Entretanto, o método da função de onda envelope parece ser a maneira mais conveniente de tratar este problema, pois leva normalmente a resultados analíticos e a extensão à cálculos auto-consistentes. No método da função de onda envelope a função de onda em cada camada da heteroestrutura é dada como o produto das funções de onda envelopes, de variação suave no espaço real, pelas correspondentes funções de onda de Bloch evoluídas num ponto de alta simetria do espaço recíproco. As funções de onda envelopes em cada camada satisfazem uma equação da massa efetiva, conectando-se através das interfaces mediante condições de contorno convenientes. Uma descrição adequada utilizando este formalismo^(34,81) exige que se conheça corretamente a simetria nas bordas das bandas de energia (máximo da banda de valência e mínimo da banda de condução).

A seguir vamos fazer um resumo dos principais trabalhos sobre impurezas em poços quânticos, entremeados com alguns comentários e figuras.

O pioneiro trabalho de Bastard⁽³³⁾ no ano de 1981, deu início ao estudo teórico das propriedades de impurezas hidrogenóides em poços quânticos. Fazendo uso do método variacional dentro da aproximação da massa efetiva, ele não somente calculou os níveis de energia das impurezas num poço quântico infinito, como também as densidades de estados

e os espectros de absorção e emissão associados as transições de impurezas entre níveis de doadores (aceitadores) e banda de valência (condução). Surgiu então o conceito de "banda de impurezas", ou seja, diferentemente do que acontece no *bulk* dos semicondutores, nos poços quânticos as energias de ligação das impurezas variam de acordo com a posição das mesmas dentro do poço. A figura 1.3 [ref.(33)] mostra a dependência da energia de ligação com a posição da impureza no poço para largura de poço $L/a_0^* = 1, 3, 5, 10$, onde $a_0^* = 100 \text{ \AA}$.

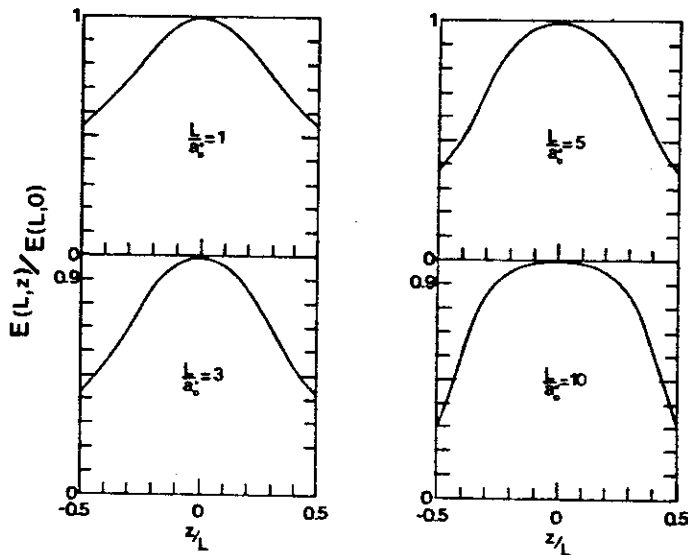


Figura 1.3

Energia de ligação em função da posição da impureza no poço quântico para várias larguras do poço (ref. 33).

Em seguida Mailhiot et al.⁽⁴¹⁾ e Greene e Bajaj⁽⁴²⁾ apresentaram resultados das energias de ligação das impurezas em relação ao estado fundamental e aos primeiros estados excitados em função da largura do poço quântico finito. Embora Mailhiot et al.⁽⁴¹⁾ tivessem incluído o potencial da carga imagem e massas efetivas distintas para as diferentes

regiões do poço quântico, os resultados apresentados nestes dois trabalhos, para impurezas situadas no centro do poço, são bastante similares. Posteriormente, trabalhos^(43,44) mostram que o efeito do potencial imagem, proveniente do uso de constantes dielétricas distintas nas diferentes camadas, apresentam resultados significantes para impurezas doadoras situadas nas bordas do poço quântico.

A figura 1.4 [ref.42] ilustra a dependência da energia de ligação das impurezas doadoras situadas no centro do poço com largura L , para dois valores de alturas de barreiras (em unidade efetivas). Como pode ser observado, a medida que L diminui a energia de ligação vai crescendo até atingir um valor máximo na vizinhança de $L=0.25$. A posição e o valor deste pico depende da altura da barreira. Depois de atingir este pico a energia de ligação cai, aproximando-se do valor do *bulk* do $Ga_{1-x}Al_xAs$ em $L=0$. Na aproximação de poço quântico infinito a energia de ligação cresce monotonicamente⁽³³⁾ até atingir, em $L=0$, o valor limite do átomo de hidrogênio em duas dimensões (4 Rydbergs efetivos).

Resultados da energia de ligação de doadores em poços de potenciais assimétricos foram apresentados por Tanaka et al.⁽⁴⁵⁾. Chaudhuri⁽⁴⁶⁾ obtém resultados para os níveis de energias das impurezas para poços quânticos múltiplos.

A estrutura complexa da banda de valência é levada em conta por Masselink et al.⁽⁴⁷⁾ para o cálculo das energias de ligação de impurezas aceitadoras num poço quântico de $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$. Foi utilizado o método variacional dentro da aproximação da massa efetiva e incluído o acoplamento entre as quatro bandas de valência dos dois materiais.

Em 1984, Chaudhuri e Bajaj⁽⁴⁸⁾ investigam o efeito da não-parabolicidade da banda de condução do $GaAs$ sobre os estados de impurezas doadoras, que é introduzido via massa efetiva com dependência na energia. A seguir, Greene e Bajaj⁽⁴⁹⁾ estudam o efeito do campo magnético aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura sobre as energias de ligação associadas ao estado fundamental e aos estados excitados das

impurezas doadoras. É mostrado que o campo magnético eleva as energias de ligação se comparado com o campo nulo, especialmente em poços estreitos.

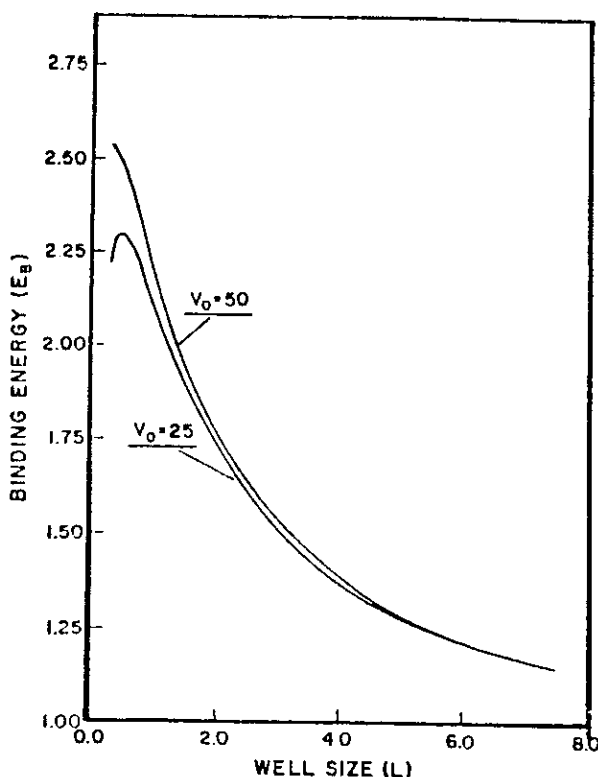


Figura 1.4

Varição da energia de ligação por unidade de Rydberg efetivo (E_B / R_0^*) associado ao estado fundamental do doador em função da largura do poço quântico por unidade de raio de Bohr efetivo (L / a_0^*), para valores de alturas de barreiras de potenciais $V_0 = 25$ e 50 , [ref.42].

Oliveira e Falicov⁽⁵⁰⁾ utilizaram uma função dielétrica com dependência espacial com características esféricas para o cálculo do espectro de energia dos doadores e aceitadores em poços quânticos. Mostra-se que este efeito se torna mais evidente para impurezas situadas no centro do poço, e para poços quânticos estreitos. No caso de impurezas doadoras este efeito é praticamente desprezível, o que não acontece com aceitadores, pois estes possuem raio de Bohr efetivo relativamente pequeno ($\approx 22 \text{ \AA}$).

Neste mesmo trabalho⁽⁵⁰⁾ é discutido a importância do cálculo das densidades de estado de impurezas. Mostra-se através do conceito de centro de gravidade da banda de impurezas que a distribuição de impurezas no poço deve ser levada em conta ao se comparar resultados teóricos com experimentais. Este argumento é reforçado pelo fato de que o centro de gravidade parece representar bem melhor os resultados experimentais do que a energia de ligação da impureza situada no centro do poço. O efeito da função dielétrica com dependência espacial é utilizado mais tarde por Oliveira^(51,52) para poços quânticos com barreiras finitas. Este trabalho aponta algumas correções aos resultados apresentados anteriormente por Mailhot⁽⁴¹⁾, Bastard⁽⁵³⁾, Shanabrook⁽⁵⁴⁾, e Delalande⁽⁵⁵⁾.

As propriedades ópticas associadas à impurezas em poços quânticos voltam a ser discutidas em 1989, por Oliveira e Alvarez^(56,57). Eles apresentam resultados de espectros de absorção óptica associados às impurezas doadoras e aceitadoras em poços quânticos finitos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs. Em seguida, Oliveira e Gondar^(58,59) apresentam resultados dos espectros de fotoluminescência relacionados à recombinação de aceitadores em poços quânticos. Posteriormente, Oliveira e Mahan⁽⁶⁰⁾ encontram boa concordância de seus resultados teóricos com experimentais (ref 61), para os espectros de fotoluminescência associados à recombinação de doadores para diferentes perfis de dopagens. Espectros de absorção óptica também foram obtidos para poços quânticos compensados^(101,102).

Neste momento vamos fazer um pequeno parênteses, para falar mais especificamente dos efeitos do campo elétrico sobre as propriedades de impurezas rasas em poços quânticos: o campo elétrico, quando aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura, provoca uma deformação longitudinal no potencial do poço quântico, de forma que o poço vai perdendo sua característica de poço quadrado e tornando-se triangular. Este efeito está representado na figura 1.5 de forma esquemática. O potencial em $z=-L/2$, "abaixa" o equivalente a uma energia de $E=|eFL/2|$, onde F é o valor do campo elétrico, enquanto que em $z=L/2$ "sobe" deste mesmo valor.

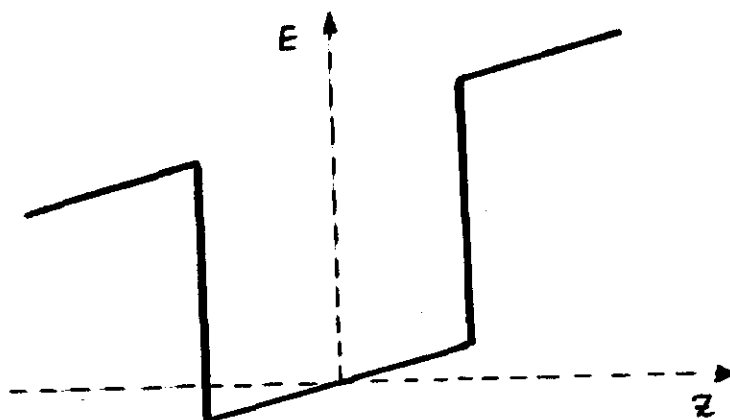


Figura 1.5

Poço quântico submetido à campo elétrico externo aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura.

O problema do poço quântico submetido a um campo elétrico externo (sem impurezas), pode ser tratado perturbativamente para campos fracos. Quando tratado desta forma, esta perturbação contribui para abaixar a energia do estado fundamental de um fator proporcional ao quadrado do campo elétrico (em aproximação de mais baixa ordem). Este fenômeno é conhecido como *Efeito Stark*⁽³⁴⁾ e em poços quânticos pode ser longitudinal ou transversal, dependendo da direção de aplicação do campo elétrico. Entretanto, este tratamento não é adequado para campos suficientemente fortes ou mesmo para larguras de poços quânticos muito largos.

Para tentar descrever este problema para qualquer valor de campo elétrico, em 1983 Bastard et. al.⁽⁶²⁾, empregaram o método variacional, tal que a função de onda tentativa é dada como o produto da solução do estado fundamental do poço (sem campo elétrico) por uma exponencial decrescente. Mais tarde, Giner e Gondar⁽⁶³⁾, Austin e Jaros⁽⁶⁴⁾ conseguem resolver exatamente este problema, para poços infinitos e finitos, respectivamente. A solução em cada camada é dada como uma combinação linear de duas

soluções independentes da equação de Airy, e os autoestados são obtidos via condições de contorno adequadas nas interfaces.

A partir destes resultados, em 1985 Brum et al.⁽⁶⁵⁾ aplicaram o modelo de Bastard⁽³³⁾ para calcular as energias de ligação de impurezas doadoras em poços quânticos finitos sob a influência de um campo elétrico externo. Masselink et. al.⁽⁶⁶⁾, dentro da mesma filosofia da ref.(47), obtêm os espectros de energia de aceitadores em poços quânticos sob influência de campo elétrico, magnético e pressão uniaxial. Apesar deste trabalho ser bastante completo os autores apresentam resultados apenas para duas posições de impurezas, no centro e na borda do poço.

Weber⁽⁶⁷⁾, Gondar et al.⁽⁶⁸⁾, usando o método variacional dentro da aproximação da massa efetiva, investigaram a influência do campo elétrico aplicado nas propriedades de absorção óptica e nas densidades de estado associadas às impurezas rasas em poços quânticos infinitos e finitos, respectivamente. Recentemente, Min Cai e Liu⁽⁶⁹⁾ descreveram o espectro de energia dos doadores num poço quântico assimétrico sob a ação de campo elétrico. Efeitos de campo elétrico e magnéticos cruzados e paralelos, sobre o espectro eletrônico e de impurezas foram calculados nas referências 70 e 71, respectivamente.

A partir de 1990, o interesse teórico em problemas relacionados com impurezas em fios e pontos de poços quânticos cresceu muito.

Weber et al.⁽⁷²⁾ apresentaram os espectros de energia e densidades de estado para impurezas em fios quânticos retangulares com barreiras infinitas. Latgé et al.^(73,74) mostram resultados para transições no infra-vermelho associadas ao estado fundamental e os primeiros estados excitados de impurezas em fios quânticos cilíndricos; para este mesmo sistema, apresentam também os espectros de fotoluminescência⁽⁷⁵⁾ relacionado a recombinação de aceitadores. Branis et al.⁽⁷⁶⁾ apresentam os primeiros resultados para as energias de ligação de doadores em fios de poços quânticos cilíndricos com barreiras infinitas sob a influência de campo magnético externo, aplicado paralelamente à direção de

crescimento da heteroestrutura. Montenegro e Merchancano⁽⁷⁷⁾ calcularam as energias de ligação para impurezas rasas em pontos quânticos esféricos.

Enquanto que a produção de poços quânticos e super-redes semicondutoras contam com uma série de técnicas bem estabelecidas, capazes de possibilitar a realização de heteroestruturas e dispositivos de boa qualidade, a elaboração no laboratório de fios e pontos de poços quânticos ainda representa um desafio tecnológico para os atuais métodos de crescimento de heteroestruturas semicondutoras. Muitos problemas para estes sistemas persistem, tais como o controle preciso da forma da seção transversal, a qualidade das interfaces, etc.

Experimentalmente, Miller et al.⁽⁷⁸⁾ apresentaram medidas de fotoluminescência em poços quânticos múltiplos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs não-dopados e dopados. Segundo os autores, estes resultados estão possivelmente associados à recombinação de aceitadores neutros com elétrons da primeira sub-banda de condução. Miller e Gossard⁽⁷⁹⁾ mostram resultados para o espectro de fotoluminescência em poços quânticos múltiplos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs dopados com Be, submetido à campo elétrico aplicado longitudinalmente. Meynadier et al.⁽⁸⁰⁾, Liu et al.⁽⁶¹⁾, também observaram medidas de impurezas em poços quânticos múltiplos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs, não-dopados, e intencionalmente dopados, respectivamente. Shanabrook et al.⁽⁸²⁾ observaram através de espalhamento Raman ressonante, transições que envolvem estados doadores em poços quânticos múltiplos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs dopados com Si. Yoo et al.⁽⁸³⁾ apresentam resultados para as energias de ligação sujeitas à campo elétrico e magnético.

Este trabalho será apresentado na seguinte ordem: no capítulo 2, nós recalculamos as energias de ligação associadas as impurezas rasas doadoras em poços quânticos finitos de GaAs-(Ga,Al)As sob a ação de um campo elétrico externo e constante, aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura. Porém nossa função de onda tentativa, associada ao potencial Coulombiano será do tipo hidrogenóide, mas com

decaimento elíptico, contendo dois parâmetros variacionais que permitirá um melhor ajuste da distribuição da carga elétrica da impureza dentro do poço quântico.

No capítulo 3, apresentamos um estudo sistemático dos espectros de absorção óptica associados aos doadores e aceitadores rasos em poços quânticos finitos de GaAs-(Ga,Al)As sob a ação de um campo elétrico externo, para vários valores de campo elétrico, largura de poços e diferentes posições de impurezas.

No capítulo 4, mostramos como os espectros de fotoluminescência relacionados a recombinação de impurezas aceitadoras em poços quânticos finitos de GaAs-(Ga,Al)As se modificam na presença de um campo elétrico externo.

No capítulo 5 analisamos o cálculo do estado fundamental de impureza hidrogenóide num poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As. Para este cálculo nós utilizamos uma função de onda tentativa que é dada como uma combinação linear das funções de onda dos estados hidrogenóides 1s e 2s multiplicadas pela função de onda do poço quântico sem o potencial da impureza.

E finalmente, o capítulo 6 será dedicado às conclusões e perspectivas futuras.

No apêndice A definiremos as unidades efetivas adotadas e nos apêndices B e C são apresentados detalhes dos cálculos referentes ao capítulo 2.

CAPÍTULO 2

Energias de Ligação de Impurezas Doadoras em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com Campo Elétrico Aplicado

2.1 Introdução

Recentemente tem sido bastante discutido^(65,67,68) os efeitos do campo elétrico aplicado nas propriedades dos estados de impurezas rasas doadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As. Brum et al.⁽⁶⁵⁾ foram os primeiros a calcular as energias de ligação dos doadores em poços quânticos na presença de um campo elétrico uniforme e perpendicular as interfaces. Eles usaram uma função de onda envelope que não depende explicitamente da posição da impureza z_i . Calcularam as energias de ligação como função da posição da impureza, para um dado valor de campo elétrico e largura do poço.

Usando a mesma função de onda envelope para as impurezas (independente de z_i), Weber⁽⁶⁷⁾ estudou as propriedades ópticas associadas aos doadores e aceitadores rasos em poços quânticos infinitos de GaAs-(Ga,Al)As sob ação de um campo elétrico externo.

Recentemente, Gondar et al.⁽⁶⁸⁾ investigaram a influência de campos elétricos sobre a densidade de estados e sobre as propriedades ópticas associadas à impurezas doadoras e aceitadoras em poços quânticos finitos de GaAs-(Ga,Al)As. Eles levaram em conta a

dependência explícita da posição da impureza na função de onda envelope que contém um único parâmetro variacional. A forma funcional que eles usaram para a função de onda tentativa é dada através da solução exata do problema do poço quântico com campo elétrico externo (sem o potencial da impureza) multiplicado pela função de onda hidrogenóide tipo-s, esféricamente simétrica, sendo sua extensão simulada por um único parâmetro variacional λ . No limite de campo elétrico nulo, esta função de onda tentativa recai no resultado utilizado por Bastard ⁽³³⁾ e quando a largura do poço tende para infinito é reproduzido o valor do *bulk* do GaAs, levando a crer que esta escolha para a função de onda envelope é mais realística do que a utilizada por Brum et al. ⁽⁶⁵⁾. Entretanto para poços quânticos estreitos ou mesmo para valores elevados de campos elétricos, a distribuição da carga eletrônica da impureza deve ser altamente anisotrópica, de forma que o uso de uma função de onda esféricamente simétrica não deve ser tão adequado.

Neste capítulo nós iremos estudar as energias de ligação associadas à impurezas rasas doadoras em poços quânticos finitos de GaAs-(Ga,Al)As sob a ação de um campo elétrico externo e constante, aplicado paralelamente à direção de crescimento da super-rede. Nós adotaremos a aproximação da massa efetiva e trabalharemos com o procedimento variacional ⁽⁸⁴⁾. A função de onda envelope adotada será dada pelo produto da solução exata do problema do poço quântico com campo elétrico externo com uma função de onda tipo hidrogenóide, porém contendo dois parâmetros variacionais, o que permitirá um melhor ajuste da distribuição da carga elétrica da impureza dentro do poço quântico.

Na seção 2.2 mostraremos o Hamiltoniano para o nosso problema, na seção 2.3 calcularemos as energias de ligação das impurezas doadoras e na seção 2.4 discutiremos e apresentaremos nossos resultados.

2.2 O Hamiltoniano

Podemos escrever, dentro da aproximação da massa efetiva⁽³⁵⁾, o Hamiltoniano das impurezas rasas doadoras em poços quânticos de GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs, na presença de um campo elétrico \vec{F} , uniforme e aplicado ao longo da direção de crescimento do poço quântico, como

$$H = H_0 + V_h(r), \quad (2.1)$$

com

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_b \theta(z^2 - L^2/4) + |e|Fz \quad (2.2)$$

e

$$V_h(r) = \frac{-e^2}{\epsilon(\rho^2 + (z - z_i)^2)^{1/2}}. \quad (2.3)$$

O centro do poço quântico é tomado como origem e z é a direção de crescimento da heteroestrutura. A borda da primeira sub-banda de condução do GaAs é definida como origem da energia. V_b é a altura da barreira, $\theta(z^2 - L^2/4)$ é a função degrau de Heaviside, L é a largura do poço quântico e \vec{F} é o campo elétrico aplicado.

O segundo termo da eq.(2.1) é o potencial Coulombiano atrativo relativo à impureza tipo hidrogenóide localizada em z_i , $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a distância radial do portador ao sítio da impureza. Tanto a constante dielétrica ϵ quanto a massa efetiva m^* do doador são tomadas como constantes ao longo da heteroestrutura, e valem 12.58⁽⁹⁴⁾ e $0.0665 m_0$, respectivamente, onde m_0 é a massa do elétron livre.

2.3 Cálculo da Energia de Ligação

Nesta seção iremos calcular a energia de ligação da impureza e, como veremos, esta grandeza dependerá da posição da impureza z_i e da largura L do poço quântico. Para tal cálculo faremos uso do método variacional, pois o Hamiltoniano H , eq.(2.1), não possui solução analítica exata. Para o problema de impurezas doadoras rasas no estado fundamental em poços quânticos sob a ação de campo elétrico, a nossa escolha para a função de onda tentativa $\Psi(\vec{r})$ é o produto da solução do estado fundamental de H_0 , eq.(2.2), (potencial do poço quântico finito mais o potencial do campo elétrico sem o potencial da impureza), pela função de onda hidrogenóide tipo-s, contendo agora dois parâmetros variacionais λ e η .

$$\Psi(\vec{r}) = N_{\lambda,\eta} \Phi_0(z) \varphi_{\lambda,\eta}(r), \quad (2.4)$$

onde $N_{\lambda,\eta}$ é a constante de normalização que depende da largura do poço quântico L , da posição da impureza e dos parâmetros variacionais λ e η .

A função de onda hidrogenóide tipo s contendo dois parâmetros variacionais, λ e η , é escolhida como

$$\varphi_{\lambda,\eta}(r) = \exp\left\{-(1/\lambda)[\rho^2 + \eta^2(z - z_i)^2]^{1/2}\right\}. \quad (2.5)$$

Pode-se observar que se tomarmos $\eta=0$ na eq.(2.5), $\varphi_{\lambda,\eta}(\vec{r})$ corresponderá ao resultado utilizado por Brum et al.⁽⁶⁵⁾, e $\eta=1$ ao do trabalho de López-Gondar et al.⁽⁶⁸⁾. A nossa escolha de uma forma com decaimento exponencial elíptico para a função de onda hidrogenóide permite uma simulação melhor para distribuição de carga elétrica da impureza no poço quântico. Esta escolha para $\varphi_{\lambda,\eta}(r)$ é compatível com a perda da

simétrica esférica devido ao confinamento da impureza no poço quântico, sendo este efeito mais ressaltado para as posições da impureza mais próximas das bordas do poço.

A solução para H_0 é escrita como

$$\Phi_0(r) = \begin{cases} C_1 e^{k_1(z+L/2)} & , z \leq -L/2 \\ \alpha \text{Ai}(\zeta) + \beta \text{Bi}(\zeta) & , -L/2 \leq z \leq L/2 \\ C_2 e^{-k_2(z-L/2)} & , z \geq L/2 \end{cases} \quad (2.6)$$

onde os valores de C_1 , C_2 , α e β que satisfazem as condições de contorno do problema são dados por:

$$\alpha = \text{Bi}'(-)a_c/L - k_1 \text{Bi}(-), \quad (2.7)$$

$$\beta = k_1 \text{Ai}(-) - \text{Ai}'(-)a_c/L, \quad (2.8)$$

$$C_{1,2} = \alpha \text{Ai}(\mp) + \beta \text{Bi}(\mp), \quad (2.9)$$

e definimos também,

$$k_{1,2} = \sqrt{(V_{1,2} - E_0)2m^* / \hbar^2}, \quad (2.10)$$

$$V_{1,2} = V_b \mp |e|FL/2. \quad (2.11)$$

O valor da altura da barreira de potencial V_b é determinado a partir da diferença das bandas proibidas, ΔE_g , entre o GaAs e $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, que é dado em função da concentração do Al, descrita pela seguinte fórmula empírica⁽⁸⁵⁾, para valores de $x \leq 0.40$:

$$\Delta E_g(\text{eV}) = 1.247y. \quad (2.12)$$

Nós consideramos que, para a banda de condução, a altura da barreira V_b corresponde a aproximadamente 60% da descontinuidade^(31,32) ΔE_g , o que é equivalente a considerar na eq. (2.12) $y=0.6$.

Temos nas expressões acima:

$$Ai[Bi](\zeta) = Ai[Bi](z a_c/L - E_0/\hbar\omega_c) \quad (2.13)$$

que são as funções de Airy regular e irregular, respectivamente (veja apêndice B). Definimos em (2.13),

$$\omega_c = \frac{(eF)^{2/3}}{(2m^*\hbar)^{1/3}} \quad (2.14)$$

e

$$a_c = \left(\frac{2m^*\omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} L. \quad (2.15)$$

Na equação (2.13), E_0 representa a energia do estado fundamental do poço quântico com o campo elétrico aplicado (sem o potencial da impureza); esta energia é obtida através da primeira raiz da equação transcendental

$$(a_c/L)^2 [Ai'(+)Bi'(-) - Ai'(-)Bi'(+)] + (k_1 a_c/L)[Ai(-)Bi'(+)- Ai'(+)Bi(-)] + (k_2 a_c/L)[Ai(+)Bi'(-) - Ai'(-)Bi(+)] + (k_1 k_2)[Ai(-)Bi(+)- Ai(+)Bi(-)] = 0 \quad (2.16)$$

onde

$$Ai(\pm)[Bi(\pm)] = Ai[Bi](\pm a_c/2 - E_0/\hbar\omega_c), \quad (2.17a)$$

$$Ai' = \frac{dAi(x)}{dx} \quad e \quad Bi' = \frac{dBi(x)}{dx}. \quad (2.17b)$$

A equação (2.16) é obtida quando impuzemos as condições de contorno de continuidade das funções de onda e sua derivada, nas interfaces do poço quântico finito:

$$\Phi_0^{\text{GaAs}}(z = \pm L/2) = \Phi_0^{\text{GaAl,As}}(z = \pm L/2), \quad (2.18a)$$

$$\Phi_0^{\prime \text{GaAs}}(z = \pm L/2) = \Phi_0^{\prime \text{GaAl,As}}(z = \pm L/2), \quad (2.18b)$$

A energia de ligação da impureza é definida como:

$$E(L, z_i) = E_0 - E(\lambda, \eta), \quad (2.19)$$

e corresponde à diferença entre a energia do estado fundamental do poço quântico com o campo elétrico aplicado (sem o potencial da impureza) e o estado fundamental de H. Para tanto, calculamos através de um procedimento variacional o seguinte valor esperado,

$$E(\lambda, \eta) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (2.20)$$

sendo, os parâmetros variacionais λ e η obtidos simultaneamente, aqueles que tornam $E(\lambda, \eta)$ mínima para uma dada posição da impureza e largura do poço.

A energia de ligação escrita de forma explícita é dada por:

$$E(L, z_i) = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\lambda^2} + \frac{\eta^2(\eta^2 - 1)}{\lambda^2} \int \frac{\Psi^*(\bar{r})(z - z_i)^2 \Psi(\bar{r})}{[\rho^2 + \eta^2(z - z_i)^2]} d^3r \right] - \langle \Psi | V_h(\bar{r}) | \Psi \rangle, \quad (2.21)$$

onde $\Psi(\bar{r})$ é descrita pela eq.(2.4).

O cálculo detalhado para obter a equação acima encontra-se no apêndice C. Note que o segundo termo entre chaves da expressão acima não aparece nos trabalhos de Brum

et al.⁽⁶⁵⁾ e nem de Gondar et al.⁽⁶⁸⁾ e é consequência da forma funcional da função de onda hidrogenóide utilizada.

As duas integrais na eq.(2.21) são analiticamente solúveis nas coordenadas cilíndricas ρ e θ e numericamente em z .

2.4 Resultados e Discussão

Alguns dos nossos resultados serão apresentados em unidades atômicas reduzidas (a.u.), que correspondem a uma unidade de comprimento de raio de Bohr efetivo a_0^* , e a uma unidade de energia de um Rydberg efetivo R_0^* , tal como são determinadas no apêndice A. Para impurezas doadoras (elétrons), $a_0^* \approx 100 \text{ \AA}$ e $R_0^* = 5.72 \text{ meV}$.

A figura 2.1 mostra os resultados para as energias de ligação de doadores em função da posição da impureza no poço quântico finito de GaAs – Ga_{0.7}Al_{0.3}As, que corresponde a uma altura de barreira $V_b \approx 224.5 \text{ meV}$, para uma largura $L = 100 \text{ \AA}$ e para valores de campo elétrico aplicado $F = 0, 100, 200 \text{ kV/cm}$.

Nesta figura, para cada curva, também mostramos o resultado correspondente obtido no trabalho de López-Gondar et al.⁽⁶⁸⁾ (curvas tracejadas). Assim, como era esperado, nossa escolha para a função de onda envelope com dois parâmetros variacionais leva a valores de energias de ligação maiores e consequentemente a obtenção do estado fundamental do sistema mais baixo, indicando então que esta permite uma distribuição mais realística da carga eletrônica do doador.

Os valores otimizados dos parâmetros variacionais λ e η correspondentes a estas energias de ligação são apresentados na figura 2.2 em função da posição da impureza. É interessante notar que para estes valores de campo elétrico e largura de poço os resultados otimizados para o parâmetro η encontram-se no intervalo $0.4 \leq \eta \leq 0.6$, o que corresponde

a uma considerável anisotropia da parte coulombiana da função de onda envelope. A figura 2.2(a) apresenta os resultados para o parâmetro λ (linha continua) comparados, caso a caso, com aqueles obtidos na referência [68] quando se tomava $\eta=1$.

Assim como foi analisado por Bastard ⁽³³⁾, nós também fizemos cálculos para valores de $L/a_0^* \gg 1$, para impurezas situadas no centro do poço e campo elétrico nulo. Verificamos que neste limite, os parâmetros variacionais λ e η assumem os valores corretos do *bulk*, isto é, a_0^* e $\eta=1$. Além disto obtivemos também que a energia de ligação nestas condições vale $1R_0^*$.

Nossos resultados para as energias de ligação para impurezas situadas no centro do poço como função da largura do poço quântico estão apresentadas na figura 2.3, para valores de campo elétrico nulo e 200 kV/cm. Para ambos os casos nossos resultados estão comparados com os determinados no trabalho de Gondar et al. ⁽⁶⁸⁾. Fica claro que para valores de largura de poço comparável com o raio de Bohr efetivo, a escolha de uma função de onda mais realística, com dois parâmetros variacionais leva a um acréscimo razoável na energia de ligação dos doadores.

A figura 2.4 mostra a distribuição da densidade de probabilidade $|\Psi(x=0, y=0, z)|^2$ para $F = 100$ kV/cm, para doadores localizados no centro (curva contínua) e na borda (curva tracejada) do poço quântico, para diferentes valores de largura do poço, (a) $L = 100 \text{ \AA}$ e (b) $L = 200 \text{ \AA}$. Fica claro que para um valor fixo de campo elétrico aplicado, a distribuição de carga associada a doadores localizados próximos a interface ($z_1/L = -0.5$) do poço não é essencialmente afetada quando alteramos a largura do poço quântico (note que as escalas horizontais das figuras 2.4a e 2.4b diferem por um fator 2). Entretanto quando aumentamos L , percebe-se um considerável deslocamento da carga eletrônica associada as impurezas situadas em $z_1/L=0$ para uma das bordas do poço quântico, indicando que o efeito do campo elétrico, ou seja, do poço de potencial "triangular", torna-se mais pronunciado na medida que se alarga o poço

quântico. O ponto angular que aparece na figura 2.4(a), na curva contínua, para $z_i/L=0$, surge devido à exponencial da função de onda hidrogenóide.

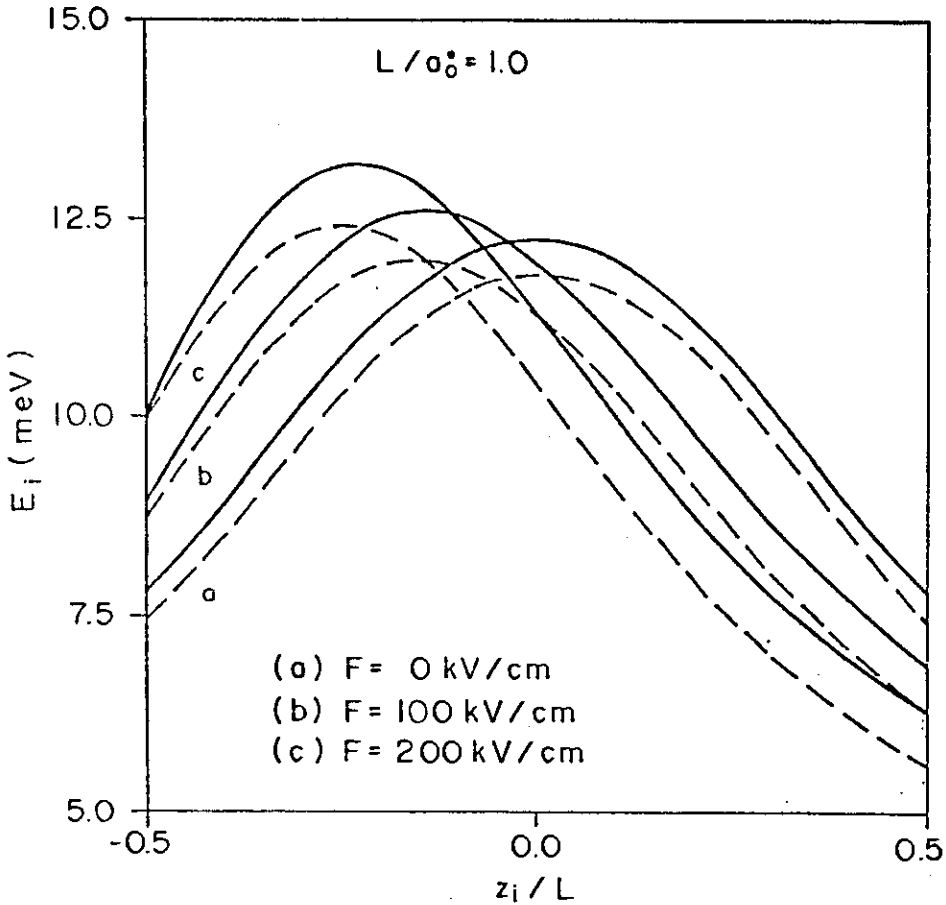


Figura 2.1

Energia de ligação de doadores em função da posição da impureza para um poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As com largura $L/a_0^* = 1$ (a_0^* é o raio de Bohr efetivo) e campo elétrico de (a) $F = 0$, (b) $F = 100$ kV/cm e (c) $F = 200$ kV/cm. As curvas contínuas correspondem aos resultados obtidos neste trabalho (função de onda envelope com dois parâmetros variacionais) e as curvas tracejadas correspondem aos resultados obtidos na referência [68] (função de onda envelope com apenas um parâmetro variacional).

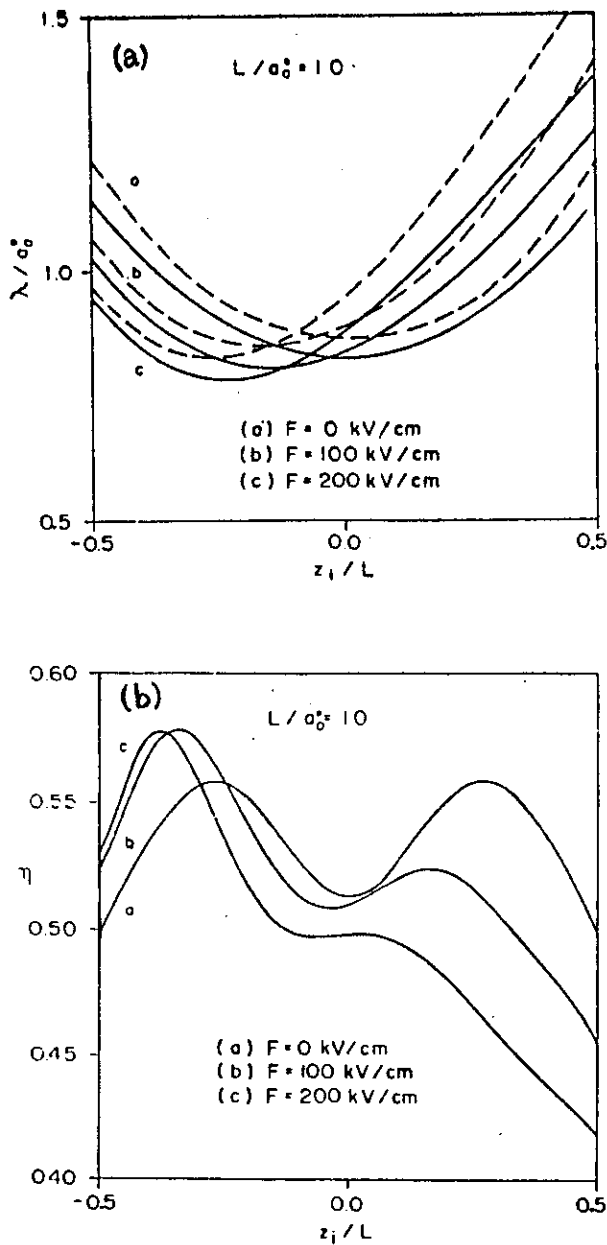


Figura 2.2

Parâmetros variacionais otimizados (a) λ e (b) η em função da posição da impureza z_i/L , que foram usados para calcular a energia de ligação de impurezas doadoras no poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As, relativo a figura anterior. Curvas contínuas correspondem aos resultados obtidos com a função de onda envelope com dois parâmetros variacionais e curvas tracejadas são os resultados obtidos na referência [68], onde a função de onda envelope tem só um parâmetro variacional. Os resultados correspondem a valores de campo elétrico (a) $F=0$, (b) $F=100$ kV/cm, (c) $F=200$ kV/cm.

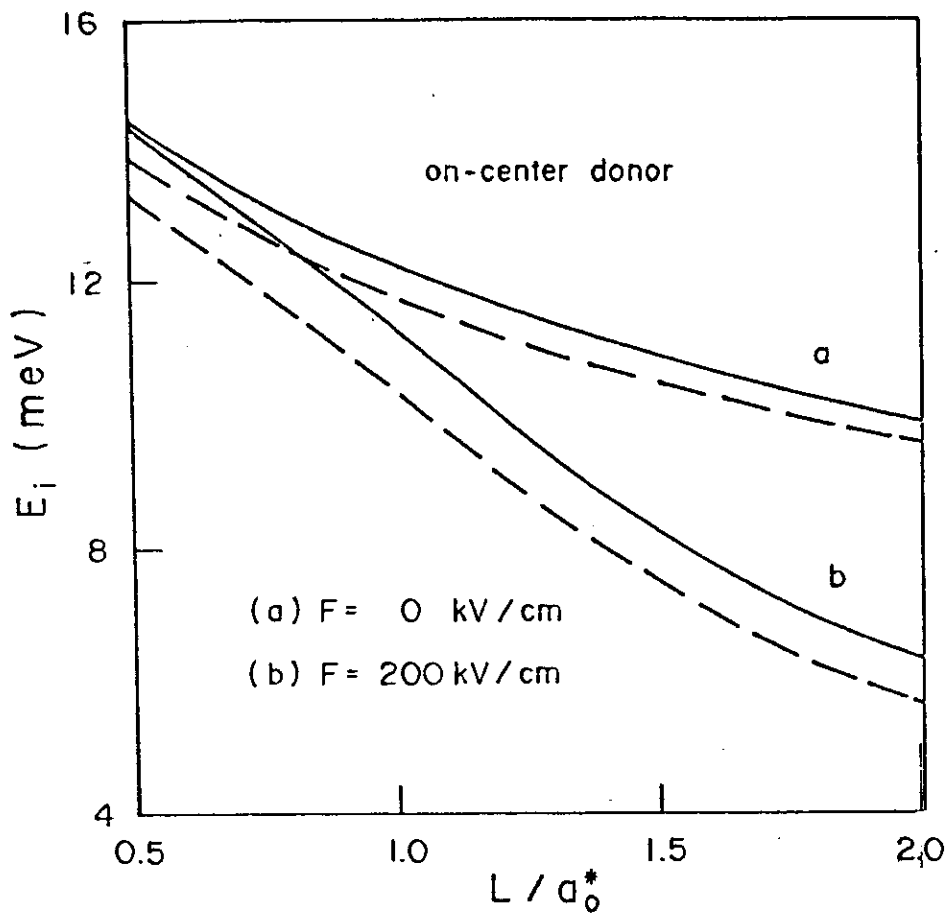


Figura 2.3

Energia de ligação de doadores em função da largura do poço quântico (a_0^* é o raio de Bohr efetivo), para impurezas localizadas no centro do poço, com campo elétrico aplicado de (a) $F=0$ e (b) $F=200$ kV/cm. As curvas contínuas correspondem aos resultados obtidos neste trabalho (função de onda envelope com dois parâmetros variacionais) e as curvas tracejadas correspondem aos resultados obtidos na referência [68] (função de onda envelope com apenas um parâmetro variacional).

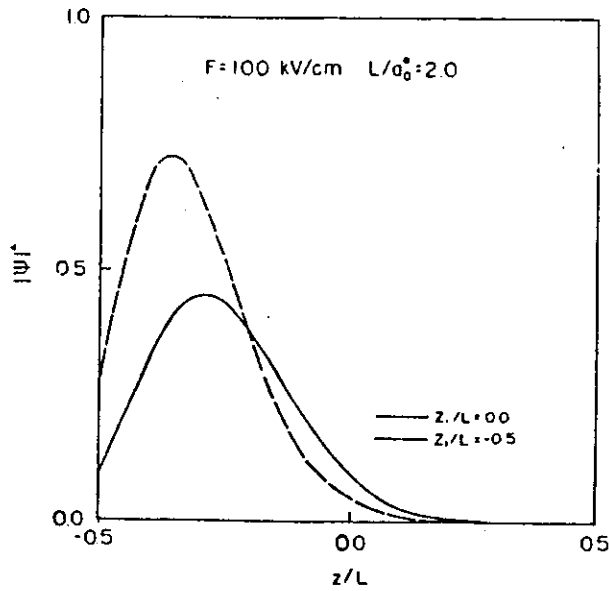
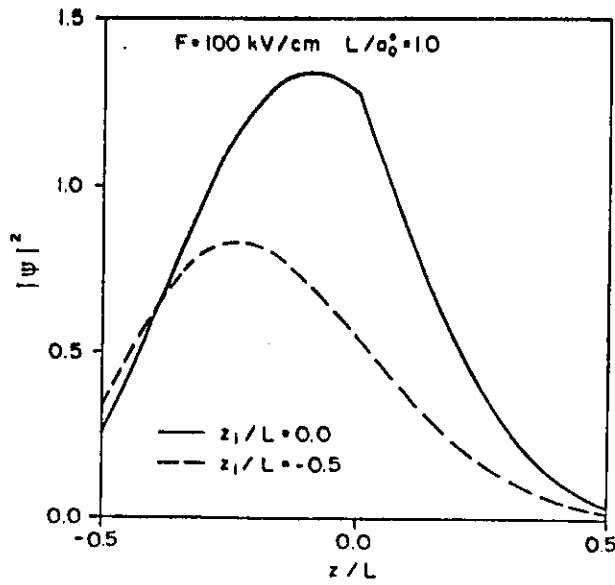


Figura 2.4

Densidade de probabilidade da $|\Psi(x=0, y=0, z)|^2$ para estados doadores num poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As com campo elétrico aplicado $F=100\text{kV/cm}$, para impurezas em $z_1/L=0$ (curva contínua) e $z_1/L=-0.5$ (curva tracejada); largura de poço (a) $L/a_0^* = 1$ e (b) $L/a_0^* = 2$.

CAPÍTULO 3

Efeitos do Campo Elétrico sobre o Espectro de Absorção Óptica de Impurezas Rasas em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As

3.1 Introdução

O entendimento das propriedades eletrônicas e de impurezas em heteroestruturas semicondutoras tais como poços quânticos, fios de poços quânticos e pontos quânticos é um problema de considerável interesse, tanto do ponto de vista teórico como do ponto de vista experimental. Atenção especial tem sido dada a heteroestruturas formadas pelos compostos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs, que exibem estrutura de banda com *gap* direto para concentração de Al abaixo de 0.45. Bastard⁽³³⁾ foi o primeiro a fazer um estudo teórico sobre o problema de impurezas hidrogenóides em poços quânticos com barreiras infinitas; ele calculou as energias de ligação, as densidades de estados das impurezas e os espectros de absorção óptica e fotoluminescência para doadores e aceitadores rasos. Experimentalmente, bastante progresso tem sido feito no preparo e caracterização das propriedades físicas das heteroestruturas semicondutoras. Shanabrook et al⁽⁸²⁾ apresentaram medidas de absorção óptica na faixa do infravermelho. Em trabalhos^{(53,54,88-}

92) recentes de revisão podem ser encontrados detalhes teóricos e experimentais sobre impurezas rasas em poços quânticos.

Neste capítulo nós estudaremos os efeitos do campo elétrico sobre o espectro de absorção óptica de doadores e aceitadores em poços quânticos finitos e infinitos de GaAs-(Ga,Al)As. A aplicação de um campo elétrico externo pode levar a significativas mudanças nas propriedades físicas dos materiais semicondutores; em particular, quando o campo elétrico estiver aplicado na direção de crescimento das heteroestruturas, a polarização na distribuição de carga e os deslocamentos dos níveis do sistema são de considerável importância para o controle e modulação do sinal de saída de dispositivos ótico-eletrônicos.

Brum et al.⁽⁶⁵⁾, Weber⁽⁶⁷⁾ e Gondar et al.⁽⁶⁸⁾ fizeram estudos teóricos sobre os efeitos de um campo elétrico externo sobre as energias de ligação e densidades de estados associados a impurezas rasas em poços quânticos.

No capítulo anterior calculamos as energias de ligação para impurezas rasas doadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob ação de um campo elétrico externo aplicado na direção de crescimento da super-rede. A função de onda tentativa escolhida para descrever o movimento do elétron dentro do poço quântico foi dada pela multiplicação da solução do potencial do poço mais o potencial do campo elétrico pela solução do estado fundamental do átomo de hidrogênio modificada; nesta última introduzimos dois parâmetros variacionais de tal forma que sua exponencial tivesse decaimento elíptico. Estes resultados foram comparados com os obtidos na ref.[68], onde a função de onda proposta só contém um parâmetro variacional. Como pode ser visto diretamente nas figuras 2.1 e 2.3, a nossa escolha para a função de onda envelope é mais apropriada pois leva a valores superiores da energia de ligação dos doadores, em consequência de termos obtido o estado fundamental do sistema mais baixo, entretanto as diferenças entre as energias de ligação calculadas através das funções de onda contendo um e dois parâmetros variacionais são pequenas, variando de acordo com a posição da

impureza, largura do poço e intensidade do campo elétrico aplicado, estas diferenças não chegam a atingir valores significativos. Em contra-partida, os cálculos numéricos realizados na minimização simultânea envolvendo duas variáveis despendem muito tempo, tornando esta abordagem computacional não muito viável. Por outro lado, como nosso interesse principal é a obtenção das propriedades ópticas relacionadas as impurezas rasas em poços quânticos, o efeito do uso de uma função de onda contendo dois parâmetros variacionais sobre os espectros de absorção óptica e de fotoluminescência seria um pequeno deslocamento para energias mais baixas em consequência termos obtido pequenas alterações nas energias de ligação. Em virtude disto nós optamos por calcular os espectros de absorção óptica de impurezas rasas doadoras e aceitadoras com uma função de onda envelope da impureza contendo apenas um parâmetro variacional.

Estudaremos absorção de fótons por um poço quântico uniformemente dopado com impurezas rasas. Usaremos concentração baixa de dopantes e as superposição entre as funções de onda dos elétrons ligados as impurezas serão consideradas desprezíveis. Particularmente, calcularemos transições do primeiro nível da banda de valência para a banda de doadores e transições da banda de aceitadores para o primeiro nível da banda de condução.

Usaremos a aproximação da massa efetiva^(34,35) e o método variacional⁽⁸⁴⁾. Iremos supor que as massas efetivas⁽⁴¹⁾ e as constantes dielétricas^(41,43,44) são as mesmas nas diferentes camadas do poço. Não iremos considerar efeitos de tunelamento introduzidos pelo campo elétrico. O campo elétrico será entendido como o campo elétrico blindado, só sendo diferente de zero dentro do poço quântico. Devido às características do sistema, tais como massa efetiva pequena em relação a massa do elétron livre ($m^* = 0.067m_0$ para doadores, e $m^* = 0.33m_0$ para aceitadores) e constante dielétrica grande em relação a do vácuo ($\epsilon = 13.1$ ⁽⁸⁷⁾ para o GaAs), teremos energias de transição qup 3 o GaAs), teremos energias de tr infravermelho longínquo.

3.2 Absorção Óptica Associada à Impurezas em Poços Quânticos Submetidos à Campo Elétrico Externo.

O Hamiltoniano para impurezas hidrogenóides em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de um campo elétrico externo aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura é dado pela eq.(2.1), em que foi utilizado um modelo de bandas parabólicas na aproximação da massa efetiva. Da mesma forma que no capítulo anterior, consideraremos que a constante dielétrica não varia ao longo do poço quântico, e vale $\epsilon = 13.1^{(87)}$. Alguns dos resultados apresentados neste capítulo serão dados em unidades efetivas (vide apêndice A).

Usaremos o método variacional⁽⁸⁴⁾ para determinar as energias de ligação da banda de impurezas e conseqüentemente os correspondentes espectros de absorção óptica. A nossa escolha para a função de onda envelope $\Psi(\vec{r})$ será dada pelo produto normalizado da solução do estado fundamental do potencial de confinamento do poço quântico com o potencial do campo elétrico Φ_0 , dado pela eq.(2.6), pela função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio modificada $\phi_\lambda(\vec{r})$, contendo um único parâmetro variacional λ . Φ_0 é o mesmo para a banda de valência como para a banda de condução, modificada apenas pelos devidos valores das constantes relativas a cada banda, isto é,

$$\Psi(\vec{r}) = N_\lambda \Phi_0(z) \phi_\lambda(r), \quad (3.1)$$

e

$$\phi_\lambda(r) = \exp\left\{-\frac{1}{\lambda} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}\right\}. \quad (3.2)$$

O valor ótimo para λ é dado pela minimização do valor esperado de

$$E(\lambda) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle. \quad (3.3)$$

A energia de ligação é definida como

$$E(L, z_i) = E_0 - E(\lambda), \quad (3.4)$$

onde E_0 é dado através da equação transcendental (2.16).

Nós estamos interessados em calcular a probabilidade de transição por unidade de tempo $W_L(z_i, \omega)$, para elétrons da primeira sub-banda de valência para a banda de doadores (associado a uma única impureza localizada em z_i); e elétrons da banda de aceitadores para a primeira sub-banda de condução, vide figura 3.1.

O Hamiltoniano de interação da radiação eletromagnética incidente com este sistema (poço com impurezas e campo elétrico aplicado) é obtido fazendo-se a seguinte substituição no Hamiltoniano da eq.(2.1)

$$\vec{P} \rightarrow \vec{P} + \frac{e\vec{A}_{rad}(\vec{r}, t)}{c}, \quad (3.5)$$

onde e é o valor absoluto da carga do elétron, $\vec{A}_{rad}(\vec{r}, t)$ é o potencial vetor da radiação incidente e c é a velocidade da luz.

$\vec{A}_{rad}(\vec{r}, t)$ pode ser escrito como

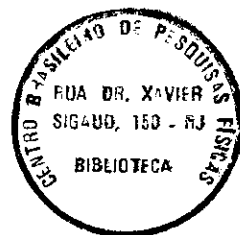
$$\vec{A}_{rad}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{u} \exp\{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t]\} + c. c. \quad (3.6)$$

onde ω é a frequência angular, \vec{k} é o vetor de onda e \vec{u} é a polarização da radiação eletromagnética incidente.

Então o novo Hamiltoniano escreve-se como

$$H(z_i) = H + H_{int}, \quad (3.7)$$

onde H é dado pela equação (2.1),



$$H_{int} = \frac{e}{2m_v^*c} (\vec{A}_{rad} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \vec{A}_{rad}) + \frac{e^2}{2m_v^*c^2} A_{rad}^2 . \quad (3.8)$$

Adotaremos o "gauge" de Coulomb de forma que em (3.8) o $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{rad}(\vec{r}, t) = 0$. Ainda na expressão acima podemos desprezar o efeito do último termo em comparação aos dois primeiros, que são lineares em A , pois estamos supondo que as fontes de radiação utilizadas tem intensidades suficientemente baixas. Então:

$$H_{int} = \frac{e}{2m_v^*c} \vec{A}_{rad} \cdot \vec{P} . \quad (3.9)$$

O efeito do campo de radiação sobre os estados de impurezas no poço quântico pode ser estudado tratando H_{int} como uma perturbação dependente do tempo.

Aplicando a Regra de Ouro de Fermi para obter a taxa de transição por unidade de tempo $W_L(z_i, \omega)$ entre os níveis envolvidos no processo de absorção, temos:

$$W_L(z_i, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |\langle \psi_i | H_{int} | \psi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) . \quad (3.10)$$

onde E_i e E_f são as energias dos estados inicial e final, respectivamente. No nosso caso teremos $E_f > E_i$ e somente a primeira componente de $A_{rad}(\vec{r}, t)$, eq.(3.6), contribuirá no processo de absorção. $\psi_{i(f)}$ são as funções de onda dos estados iniciais e finais, que é dada pela expressão (3.1) multiplicada pela parte periódica da função de Bloch.

Ao calcularmos os elementos de matriz da expressão (3.10), fazemos o uso da aproximação do comprimento de onda longo, de modo que $\exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}] \approx 1$, pois o comprimento de onda da radiação infravermelho distante é da ordem de 10^6 \AA , enquanto que as dimensões típicas das camadas das heteroestruturas ficam entre 50 \AA à 200 \AA . Logo,

$$W_L(z_i, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{2m_v^*c} \right)^2 \sum_i |\langle \psi_i | \bar{u} \cdot \bar{P} | \psi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (3.11)$$

Vamos usar o fato que as funções de onda envelopes variam muito pouco no espaço real, de modo que podemos supôr que estas são praticamente constantes em cada célula primitiva. Então

$$\langle \psi_i | \bar{u} \cdot \bar{P} | \psi_f \rangle \approx \bar{u} \cdot \bar{P}_n S_n, \quad (3.12)$$

onde

$$\bar{P}_n = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\bar{r} u_f^*(\bar{r}) \bar{P} u_i(\bar{r}), \quad (3.13)$$

e

$$S_n(z_i, \lambda, k_{\perp}) = \int d\bar{r} \Psi_f^*(\bar{r}) \Psi_i(\bar{r}). \quad (3.14)$$

Ω significa o volume da célula unitária, u_i e u_f são as partes periódicas dos estados de Bloch para os estados inicial e final e Ψ_i e Ψ_f são as funções envelopes dos estados inicial e final. Portanto,

$$W_L(z_i, \omega) \cong \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{2m_v^*c} \right)^2 \sum_i |\bar{u} \cdot \bar{P}_n|^2 S_n^2(z_i, \lambda, k_{\perp}) \delta \left[\left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_v^*} \right) + \varepsilon_g - E(z_i, L) - \hbar\omega \right]. \quad (3.15)$$

Ou ainda,:

$$W_L(z_i, \omega) \cong \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eA_0}{2m_v^*c} \right)^2 \sum_i |\bar{u} \cdot \bar{P}_n|^2 S_n^2(z_i, \lambda, k_{\perp}) \left(\frac{m_v^*}{\hbar^2 k_{\perp}'} \right) \delta(k_{\perp} - k_{\perp}'), \quad (3.16)$$

onde

$$k_{\perp}' = \sqrt{2m_v^* \Delta / \hbar^2} \quad (3.17)$$

$$\Delta = \varepsilon_{\mathbf{s}} - E(z_i, L) - \hbar\omega, \quad (3.18)$$

e

$$\varepsilon_{\mathbf{s}} = E_{\mathbf{s}} + E_{n-1}^c + E_{n-1}^v, \quad (3.19)$$

onde $E_{\mathbf{s}}$ é o *gap* de energia do GaAs, $E_{n-1}^{(v)}$ é a energia da borda (topo) da primeira sub-banda de condução (valência).

Como temos dois graus de liberdade (k_x e k_y), o somatório dos estados iniciais (i) passa a ser uma integral dupla no espaço dos k_{\perp} . Então a probabilidade de transição pode ser escrita como

$$W_L(z_i, \omega) = W_0 \frac{1}{2} \frac{m_v^*}{m_0} \frac{1}{a_0^2} S_i^2(z_i, \lambda, k'_{\perp}) \Theta(\Delta), \quad (3.20)$$

onde

$$W_0 = \frac{4m_0}{\hbar^3} a_0^2 |\bar{u} \cdot \bar{P}_n|^2 \left(\frac{eA_0}{m_v^* c} \right)^2, \quad (3.21)$$

Vamos calcular a integral dada pela eq.(3.14) para a situação de elétrons transicionando da primeira sub-banda de valência para a banda de impurezas doadoras.

Temos então

$$S_n(z_i, \lambda, k'_{\perp}) = N^v N^d \int \Phi_0^c(z) \varphi_{\lambda}(r) \Phi_0^v(z) e^{-i\vec{k}'_{\perp} \cdot \vec{\rho}} \rho d\rho d\theta dz, \quad (3.22)$$

onde N^v e N^d são as constantes de normalização da primeira sub-banda de valência, e da banda de doadores.

Mas,

$$\int_0^{2\pi} e^{-ik_{\perp} \rho \cos \theta} d\theta = 2\pi J_0(k_{\perp} \rho), \quad (3.23)$$

onde $J_0(k_{\perp}\rho)$ é a função de Bessel cilíndrica de ordem zero.

Substituindo as equações (3.9) e (3.2) em (3.8), e fazendo a mudança de variável,

$x = \sqrt{\frac{\rho^2}{(z-z_i)^2} + 1}$, ficamos com:

$$S_{\eta} = 2\pi N^v N^d \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0^c(z) \Phi_0^v(z) dz \int_1^{\infty} \exp[-x|z-z_i|/\lambda] J_0(k'_{\perp}|z-z_i|\sqrt{x^2-1}) x dx . \quad (3.24)$$

Usando que:

$$\int_1^{\infty} \exp[-xs] J_0(t\sqrt{x^2-1}) x dx = \left(\frac{s}{s^2+t^2} \right) \left[1 + \frac{1}{(s^2+t^2)^{1/2}} \right] e^{-(s^2+t^2)^{1/2}} , \quad (3.25)$$

e fazendo $s = |z-z_i|/\lambda$ e $t = k_{\perp}|z-z_i|$, obtemos:

$$S_{\eta}(z_i, \lambda, k'_{\perp}) = \frac{2\pi}{\lambda\beta^3} N^v N^d \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0^c(z) \Phi_0^v(z) (1 + \beta|z-z_i|) e^{-\beta|z-z_i|} dz , \quad (3.26)$$

onde $\beta = \sqrt{(1/\lambda)^2 + k_{\perp}^2}$.

A integral $S_{\eta}(z_i, \lambda, k'_{\perp})$, eq.(3.26), é analiticamente solúvel em z para valores de $|z| \geq L/2$, e devido as funções de Airy, dentro do poço quântico deve ter um tratamento numérico.

Finalmente, o número total de transições por unidade de tempo e por unidade de volume é dado por

$$W_L(\omega) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dz_i n_d(z_i) W_L(z_i, \omega) , \quad (3.27)$$

onde $n_d(z_i)$ é a distribuição de impurezas doadoras. Neste trabalho nós consideramos uma distribuição homogênea de impurezas dentro do poço quântico, isto é $n_d(z_i)=1$.

O caso de transições da banda de impurezas aceitadoras para a primeira sub-banda de condução é obtido fazendo-se a troca de $m_v^* \rightarrow m_c^*$ e trocando os potenciais associados às sub-banda de valência e condução.

3.3 Resultados e Discussão

Neste item nós apresentaremos nossos resultados dos espectros de absorção óptica associados às impurezas em poços quânticos de GaAs – Ga_{1-x}Al_xAs. Nossos cálculos foram feitos para a concentração de Al $x=0.3$, o que corresponde a uma altura de barreira $V_b^c=224.5\text{meV}$ para a banda de condução e de $V_b^v=149.6\text{meV}$ para a banda de valência. Apresentaremos os resultados da absorção óptica para os seguintes casos: da primeira sub-banda de valência para a banda de impurezas doadoras e da banda de impurezas aceitadoras para a primeira sub-banda de condução. Os estados de impurezas estão ionizados pois estamos supondo uma energia térmica muito maior do que as energias de ligação das impurezas. Estamos adotando um modelo de bandas parabólicas para descrever os estados de valência (aceitadores), embora uma descrição mais realística seria considerar o acoplamento das quatro bandas de valência em virtude de sua degenerescência no topo da banda⁽⁴⁷⁾. Nossos resultados são apresentados para várias larguras de poços quânticos e para diferentes intensidades do campo elétrico externo. Comparamos nossos resultados de barreiras finitas com os de barreiras infinitas.

As absorções ópticas associadas às transições que envolvem estados doadores são apresentadas nas Fig.3.2 (a) barreiras infinitas e (b) barreiras finitas, para largura de poço quântico $L=100 \text{ \AA}$ e intensidades de campos elétricos $F = 0, 50, 100$ e 150 kV/cm . Para campo nulo nossos resultados concordam com os encontrados por Oliveira e Pérez-Alvarez^(56,57). Como pode ser visto, o efeito da aplicação do campo elétrico é introduzir um deslocamento no espectro para frequências mais baixas, e reduzir a intensidade da

absorção. Nota-se claramente que este efeito é mais pronunciado no espectro correspondente a poço quântico com barreiras finitas. Para um dado valor de campo elétrico, a principal característica deste espectro é apresentar singularidades tipo van-Hove. No caso de impurezas doadoras, a primeira singularidade está associada à transições envolvendo doadores que estão localizados no topo da banda de impurezas e a segunda e terceira singularidades estão associadas aos doadores em $z_i = -L/2$ e $z_i = L/2$, respectivamente; veja fig.3.3. No caso de impurezas aceitadoras a segunda estrutura está associada aos aceitadores em $z_i = L/2$ e a terceira a aqueles situados em $z_i = -L/2$. A figura 3.3 compara os espectros de absorção óptica do poço quântico de barreiras finitas (curva contínua) com o de barreiras infinitas (curva tracejada) para uma mesma largura do poço $L=100\text{Å}$, e intensidade de campo elétrico $F=100\text{kV/cm}$.

O deslocamento do espectro de absorção óptica para frequências mais baixas é essencialmente devido a redução na diferença de energias entre a primeira banda de valência e os estados doadores no poço quântico, causado pela aplicação do campo elétrico que gradualmente transforma o poço quadrado num poço de formato triangular.

A medida que a intensidade do campo elétrico aumenta, a intensidade da absorção diminui como decorrência da diminuição na superposição das funções de onda do estado doador com o estado de valência. A Fig.3.4 mostra a densidade de probabilidade para os estados doadores de impurezas localizadas no centro do poço e da primeira sub-banda de valência, para $F=100\text{kV/cm}$. Pode-se observar que esta redução na superposição é mais pronunciada para poços de barreiras finitas, pois neste caso as funções de onda podem penetrar nas barreiras.

O espectro de absorção óptica relacionado a doadores rasos em poços quânticos de $\text{GaAs} - \text{Ga}_{1-0.3}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ para larguras $L=50\text{Å}$ e $L=200\text{Å}$ são apresentados nas Fig.3.5 e Fig.3.6, respectivamente, para diferentes valores de campo elétrico aplicado. Comparando ambas as figuras, pode-se notar que o poço de maior dimensão apresenta um deslocamento para energias baixas mais acentuado, indicando que o efeito do campo elétrico se torna

mais pronunciado neste caso. Também o desdobramento das estruturas relacionadas as singularidades de van-Hove associadas às impurezas nas bordas do poço, torna-se mais acentuada com o crescimento do campo elétrico ou com o crescimento da largura do poço quântico. Para $L=200\text{\AA}$ e um campo elétrico aproximadamente maior do que $F=100\text{kV/cm}$, ocorre uma dramática diminuição na intensidade da absorção, que é devida a uma forte redução na superposição das funções de onda da banda de doadores com a de valência, tal como é mostrado na Fig.3.7, para doadores situados no centro do poço quântico.

A Fig.3.8 mostra o espectro de absorção óptica para transições da sub-banda de valência para banda de doadores para poços de barreiras finitas (curva contínua) e poços de barreiras infinitas (curva tracejada) para largura $L=100\text{\AA}$ e campo elétrico $F=200\text{kV/cm}$; como foi discutido acima, a intensidade da absorção óptica para o caso de barreiras finitas é muito menor do que para o caso de barreiras infinitas.

As Fig.3.9 e Fig.3.10 apresentam os espectros de absorção óptica das transições da banda de impurezas aceitadoras para a primeira sub-banda de condução, para poços quânticos infinitos e finitos, para largura de poço $L=100\text{\AA}$ e para diferentes valores de campo elétrico aplicado. No caso do poço de barreiras infinitas, nossos resultados concordam qualitativamente com os encontrados por Weber⁽⁶⁷⁾ (note que a escolha que ele fez para a função de onda envelope leva a uma descrição menos detalhada da forma da curva de absorção óptica). Comparando a Fig.3.9 com a Fig.3.10 pode-se notar que as curvas de absorção para poços finitos são mais estreitas do que as curvas para os infinitos, como também a dependência dos espectros de absorção óptica dos aceitadores com o campo elétrico comportam-se distintamente. Em ambos os casos as transições associadas as impurezas situadas em $z_i = -L/2$, a medida que o campo elétrico aumenta, torna-se cada vez menos perceptível. Este comportamento pode ser compreendido através da análise das curvas de energia de ligação em função da posição da impurezas aceitadoras para diferentes valores do campo elétrico (vide Fig.3.11). A intensidade da absorção

óptica é basicamente determinada pela *densidade conjunta de estados*⁽⁹³⁾ entre a banda de aceitadores e a sub-banda de condução, e também pela superposição das funções de onda. Assim como já havíamos comentado, o efeito da aplicação de um campo elétrico externo diminui a superposição das funções de onda dos estados envolvidos na transição. Entretanto a dependência da curva de energia de ligação com o campo elétrico F é de tal forma que o inverso de sua derivada com respeito a posição da impureza, ou seja a densidade de estados das impurezas⁽³³⁾, em $z_i = -L/2$ aumenta com o campo elétrico, enquanto que em $z_i = L/2$ exibe comportamento oposto, veja Fig.3.12. Como consequência, a singularidade tipo van-Hove associada as impurezas localizadas em $z_i = L/2$ rapidamente desaparece com o aumento do campo elétrico, enquanto que a estrutura associada aos estados aceitadores em $z_i = -L/2$ inicialmente torna-se mais pronunciada até o valor de campo elétrico próximo de $F \approx 100$ kV/cm e depois decresce em virtude da redução da superposição entre as funções de onda associadas aos estados inicial e final.

Fizemos uma análise sistemática das formas de linhas da absorção óptica relacionada com impurezas doadoras e aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de um campo elétrico externo e constante, aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura. Nós investigamos a dependência do espectro com a largura do poço e intensidade do campo elétrico. O espectro de absorção apresenta um pico associado a transições para o topo da banda de impurezas e duas singularidades do tipo van Hove, que correspondem a transições para impurezas situadas nas bordas do poço quântico. Estas duas singularidades transformam-se em uma única no limite de campo elétrico nulo. Na medida que a intensidade do campo elétrico aumenta, o espectro de absorção é deslocado para energias mais baixas, suas intensidades reduzidas e a importância relativa das singularidades de van Hove alteradas. Tal efeito torna-se mais pronunciado em poço largos.

Do nosso conhecimento, não existem dados experimentais que descrevam o espectro de absorção óptica de impurezas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de campo elétrico. Entretanto, estas medidas podem ser efetuadas, e nós acreditamos que os resultados presentes neste trabalho serão de grande importância para a interpretação dos dados experimentais e compreensão deste fenômeno.

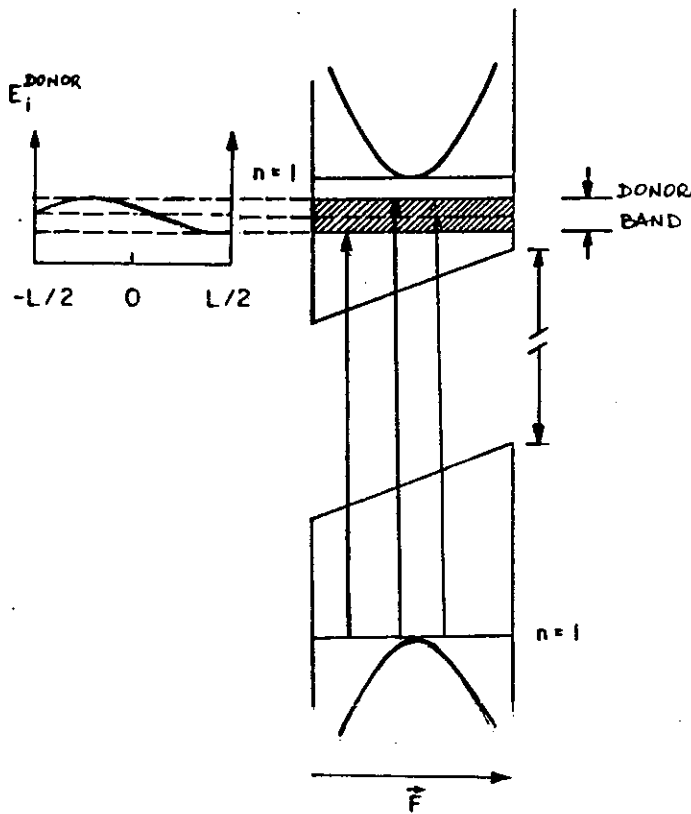


Figura 3.1

Representação esquemática do poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As com banda de impurezas doadoras, submetido a um campo elétrico constante F . As parábolas representam uma visão pictórica da relação de dispersão de $\bar{k}_{||}$ para as sub-bandas de valência e de condução. As setas indicam as possíveis transições.

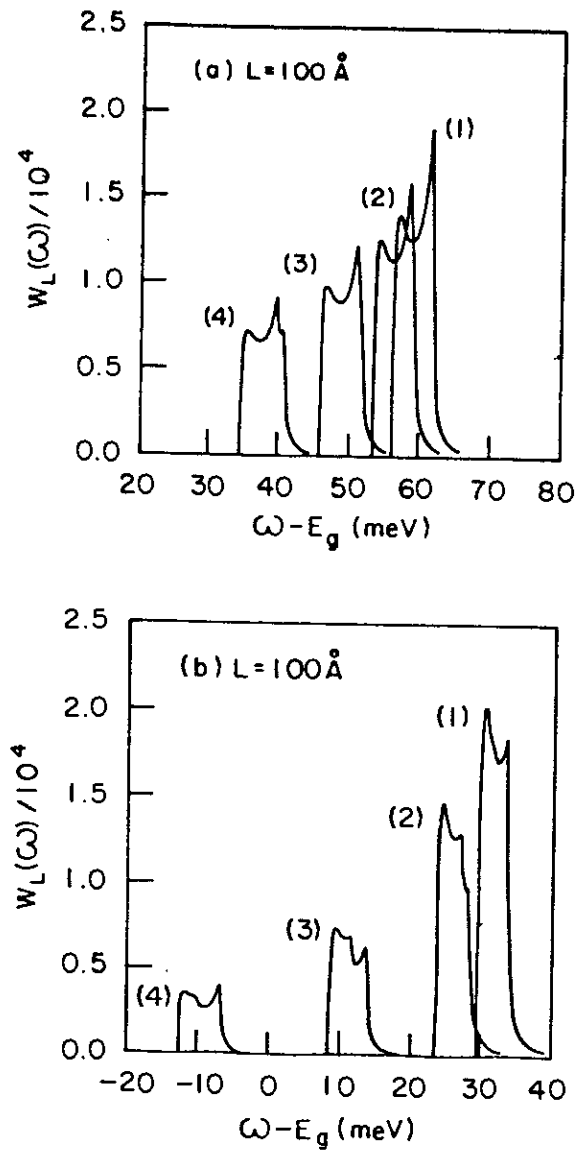


Figura 3.2

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas doadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo para o poço quântico (a) infinito e (b) finito de GaAs - $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ com largura $L=100 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para campos elétricos de (1) $F=\text{zero}$, (2) $F=50\text{kV/cm}$, (3) $F=100\text{kV/cm}$ e (4) $F=150\text{kV/cm}$.

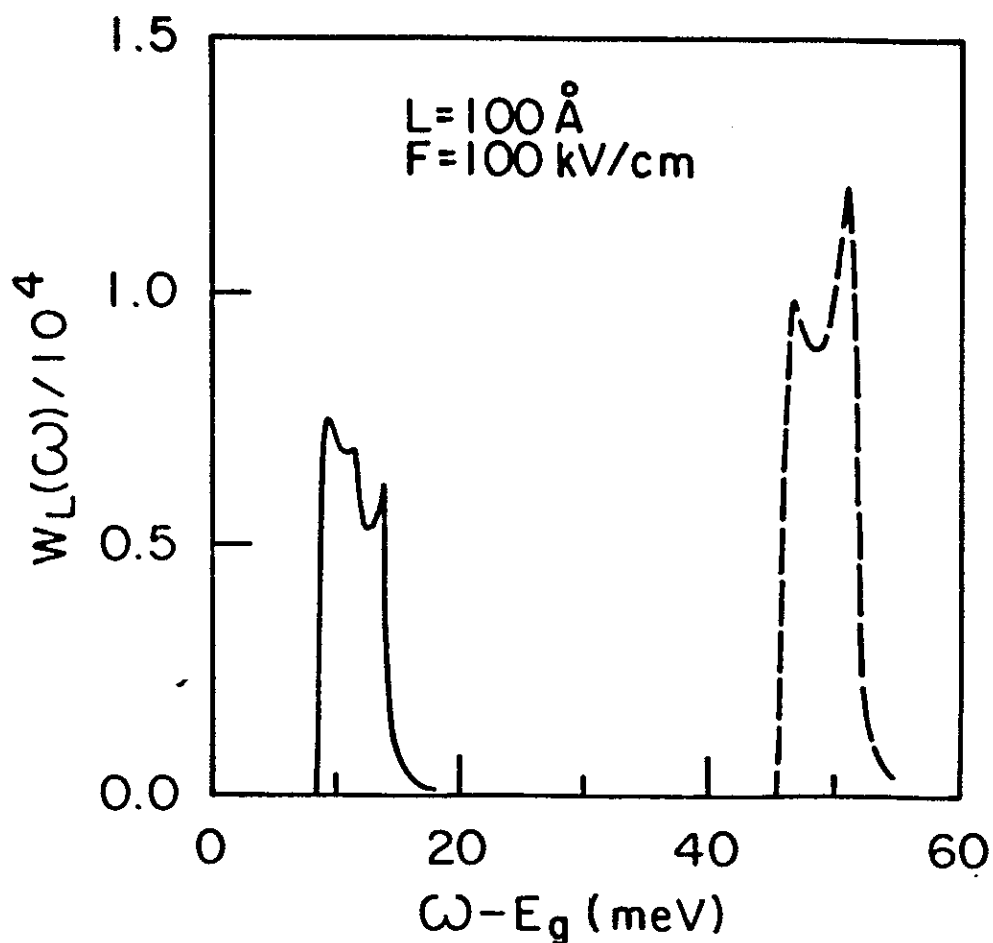


Figura 3.3

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas doadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo $F=100 \text{ kV/cm}$, para o poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As de largura $L=100 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para potenciais de barreiras infinita (curva tracejada) ou finita (curva contínua). E_1, E_2 e E_3 estão relacionados com as transições de doadores, (vide texto).

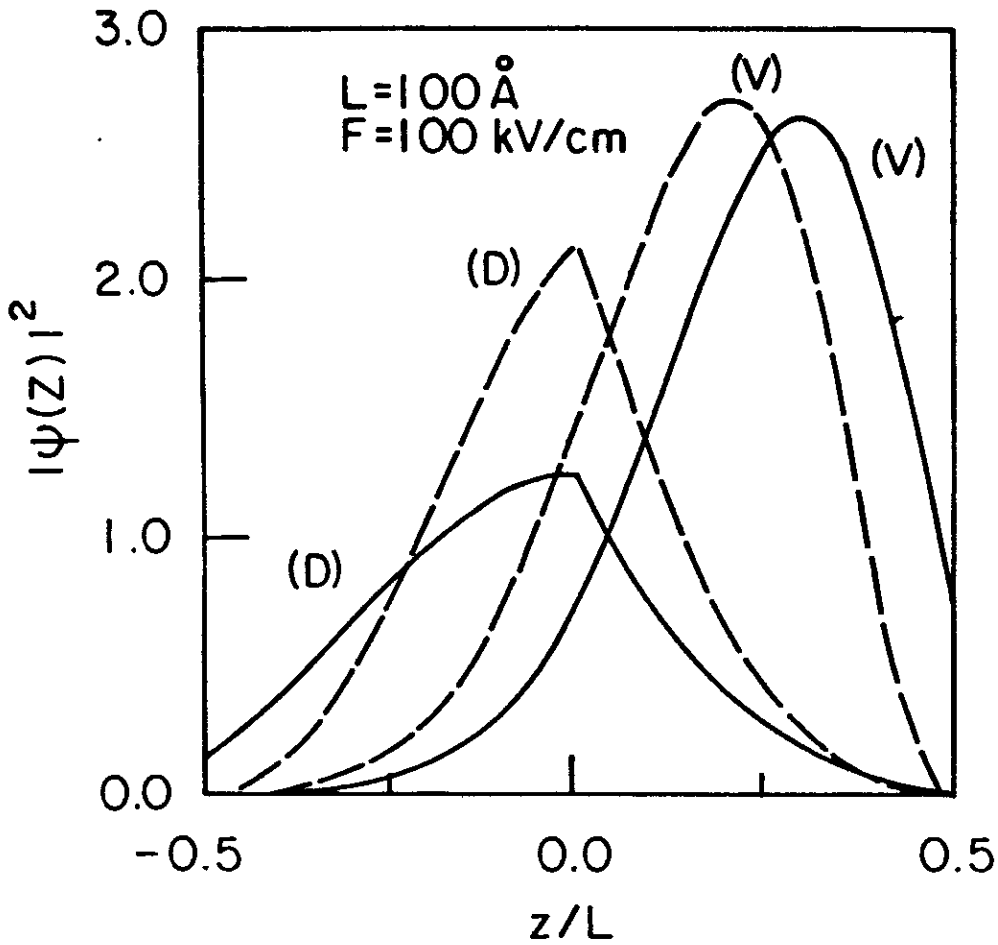


Figura 3.4

Densidade de Probabilidade correspondente às funções de onda envelope $\Psi(x = 0, y = 0, z)$ para os estados de valência (V) $n=1$, e para os estados doadores (D) situados no centro do poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As de largura $L=100 \text{ \AA}$ e campo elétrico $F= 100 \text{ kV/cm}$, para potenciais de barreiras finita (curva contínua) ou infinita (curva tracejada).

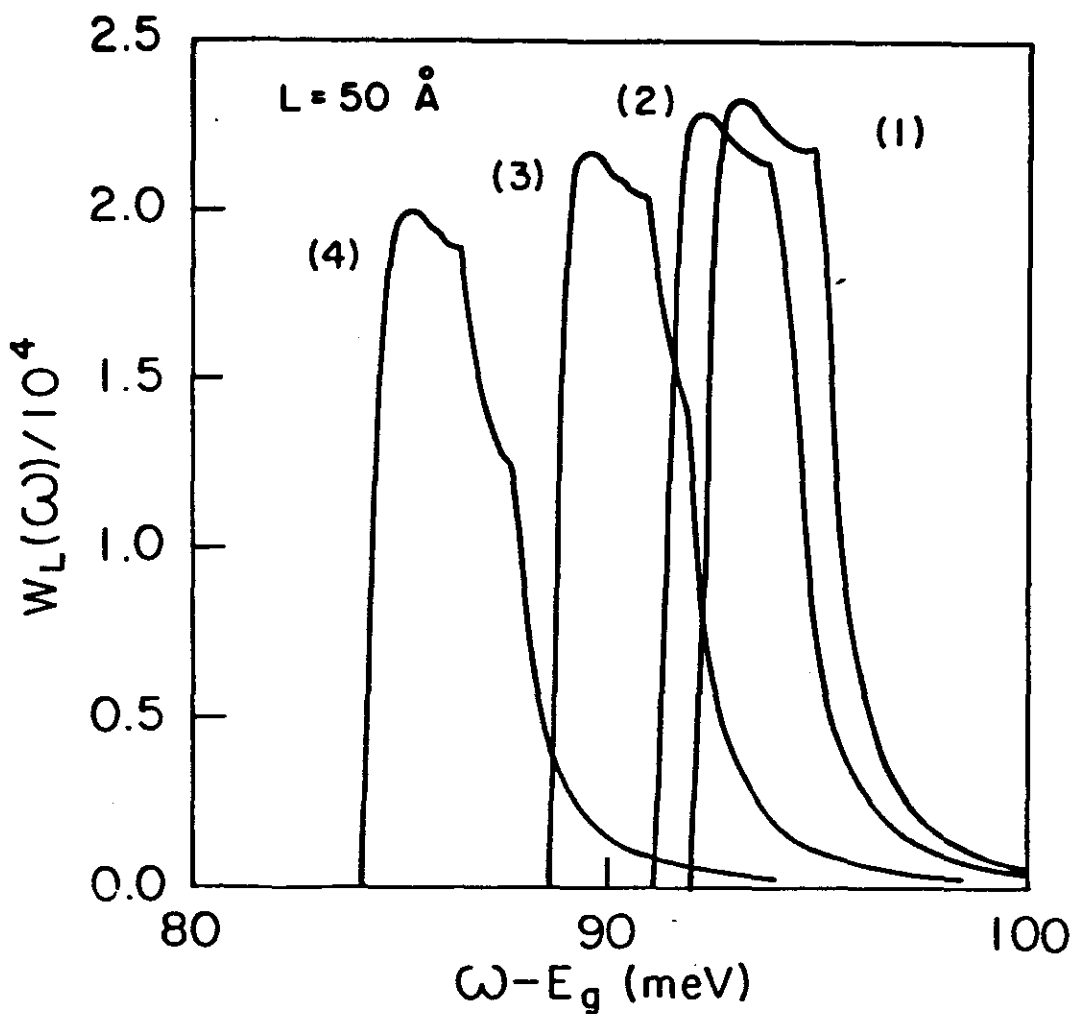


Figura 3.5

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas doadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo para o poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As de largura $L=50 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para campos elétricos de (1) $F=$ zero, (2) $F=50 \text{ kV/cm}$, (3) $F=100 \text{ kV/cm}$ e (4) $F=150 \text{ kV/cm}$.

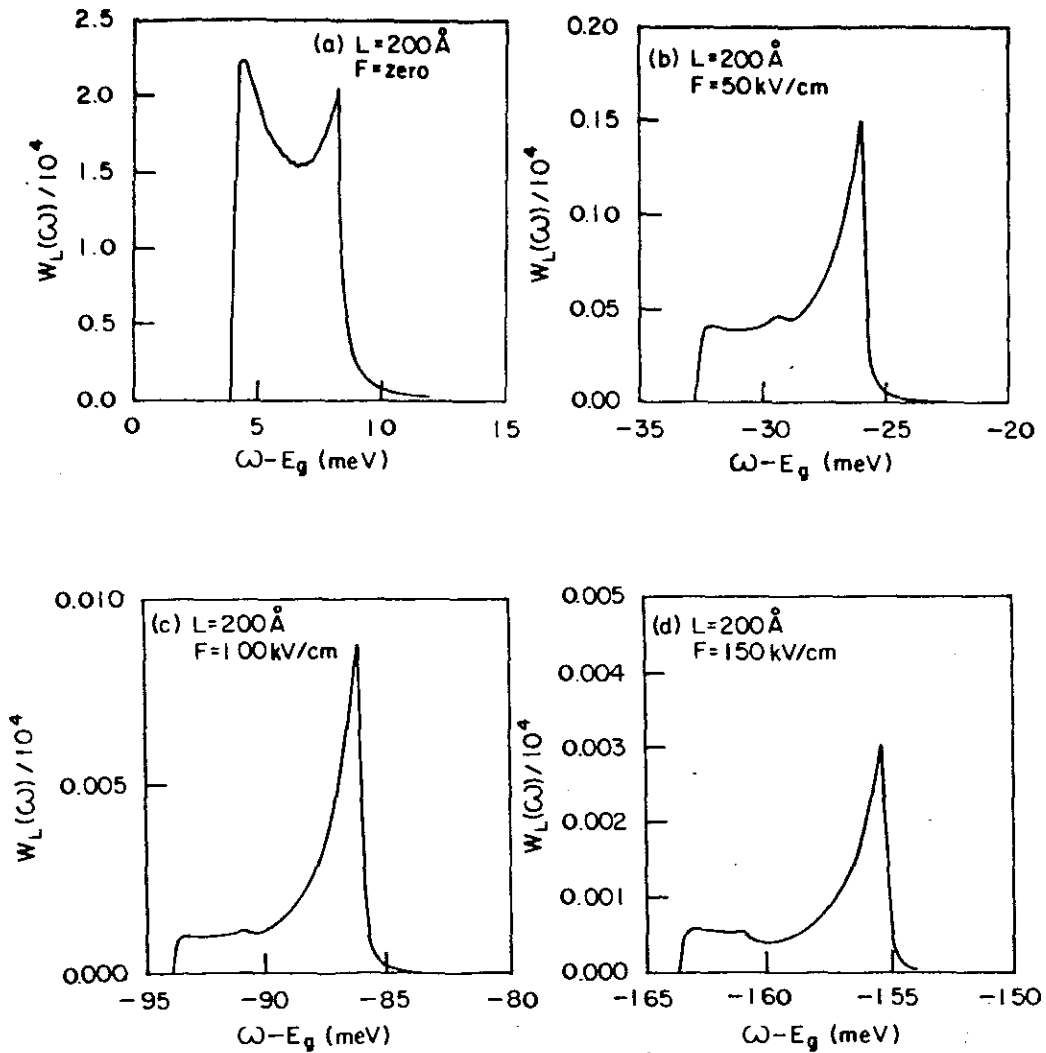


Figura 3.6

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas doadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo para o poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As de largura $L=200 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para campos elétricos de (a) $F=0$, (b) $F=50 \text{ kV/cm}$, (c) $F=100 \text{ kV/cm}$ e (d) $F=150 \text{ kV/cm}$.

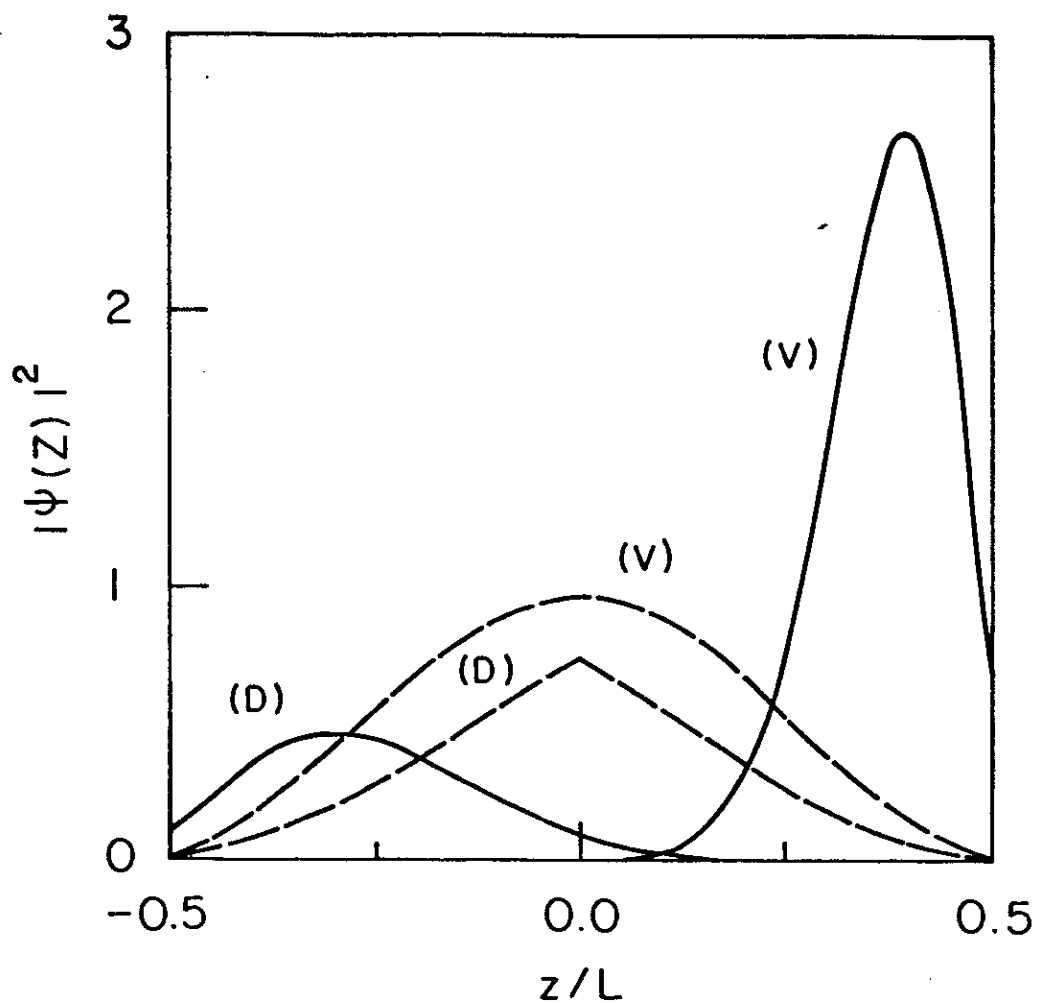


Figura 3.7

Densidade de Probabilidade correspondente as funções de onda envelope $\Psi(x = 0, y = 0, z)$ para os estados de valência (V) $n=1$, e para os estados de doadores (D) situados no centro do poço quântico de GaAs - $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ de largura $L=200\text{\AA}$ e campos elétricos $F= 100$ kV/cm (curva contínua) e $F=\text{zero}$ (curva tracejada).

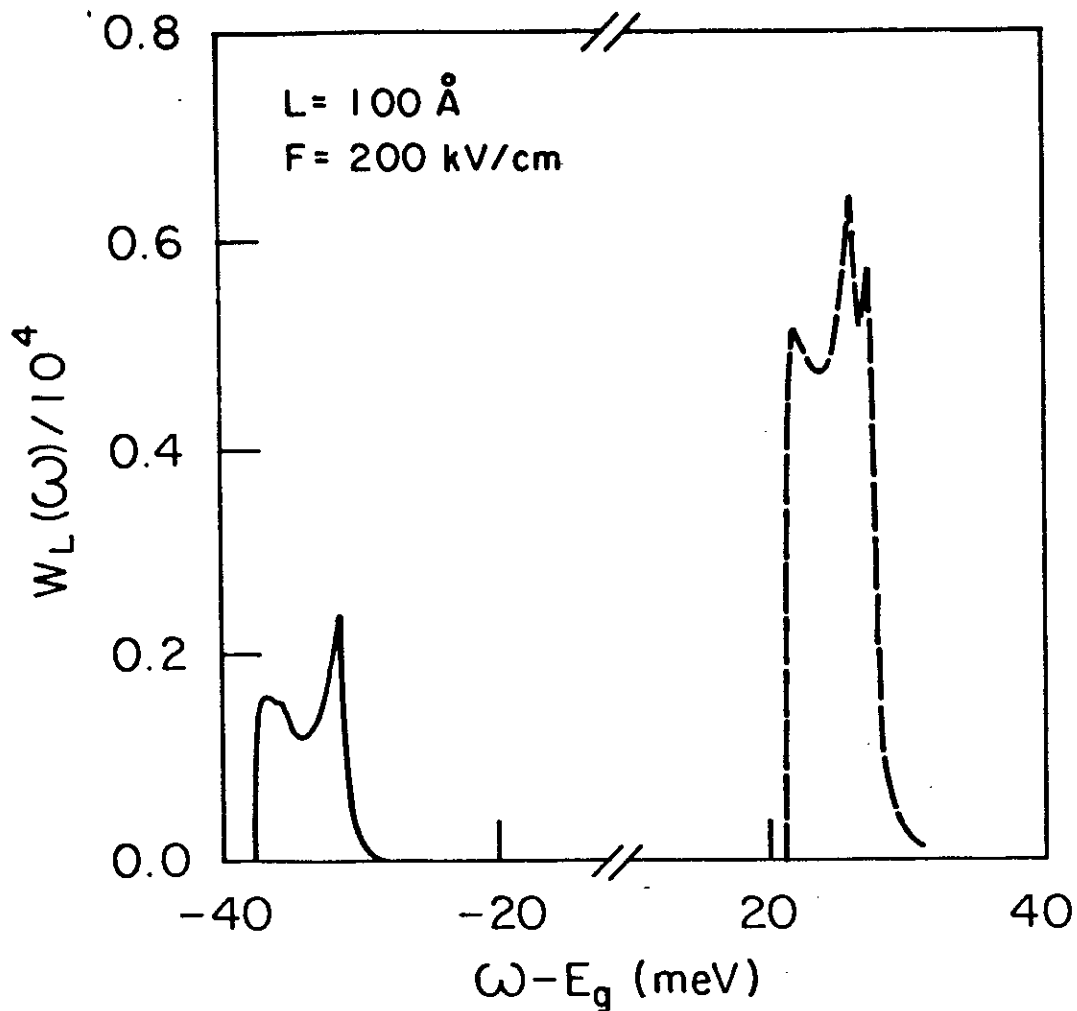


Figura 3.8

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas doadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo $F = 200 \text{ kV/cm}$, para o poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As de largura $L = 100 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para potenciais de barreiras infinita (curva tracejada) ou finita (curva contínua).

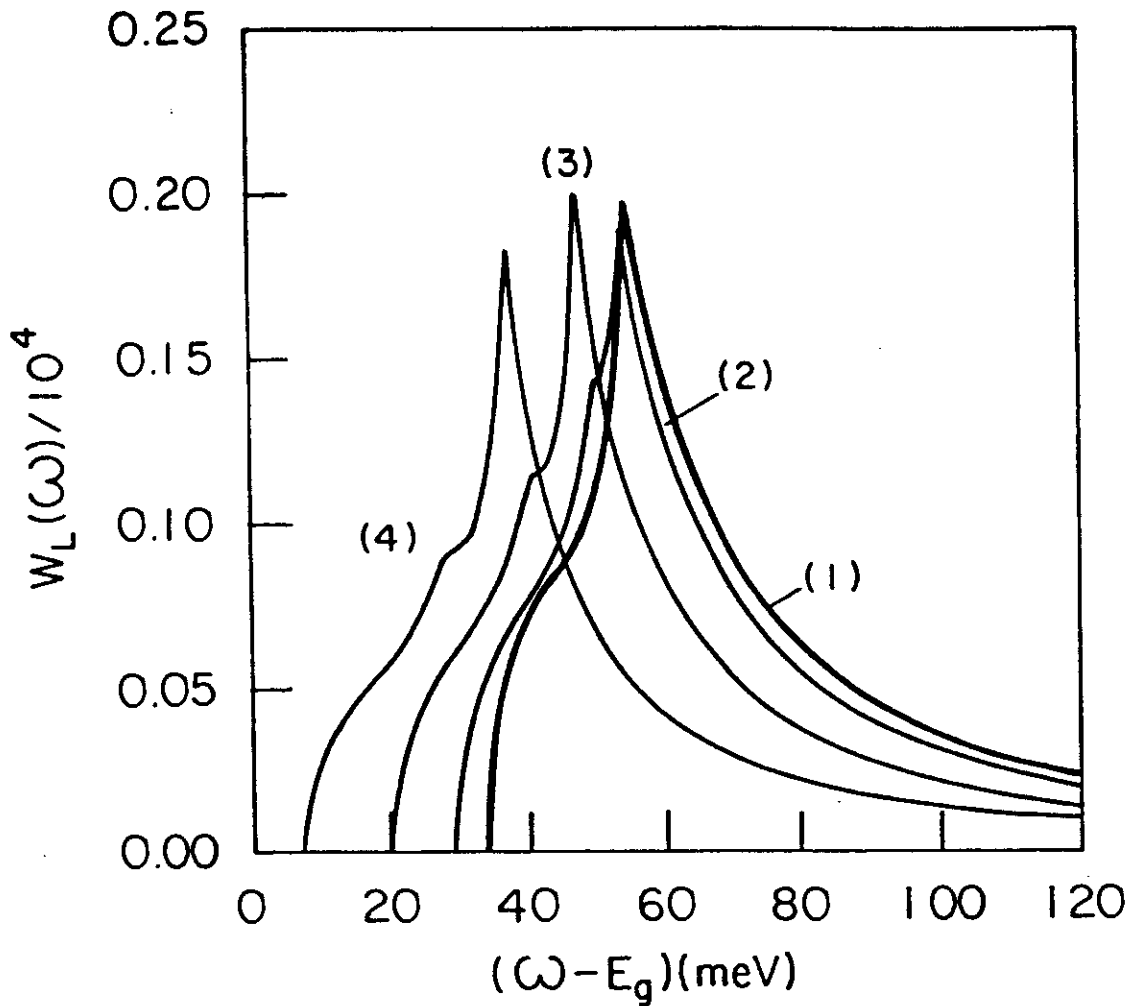


Figura 3.9

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas aceitadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo para o poço quântico *infinito* de GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As com largura $L=100\text{Å}$. Os resultados são apresentados para campos elétricos de (1) $F=\text{zero}$, (2) $F=50\text{kV/cm}$, (3) $F=100\text{kV/cm}$ e (4) $F=150\text{kV/cm}$.

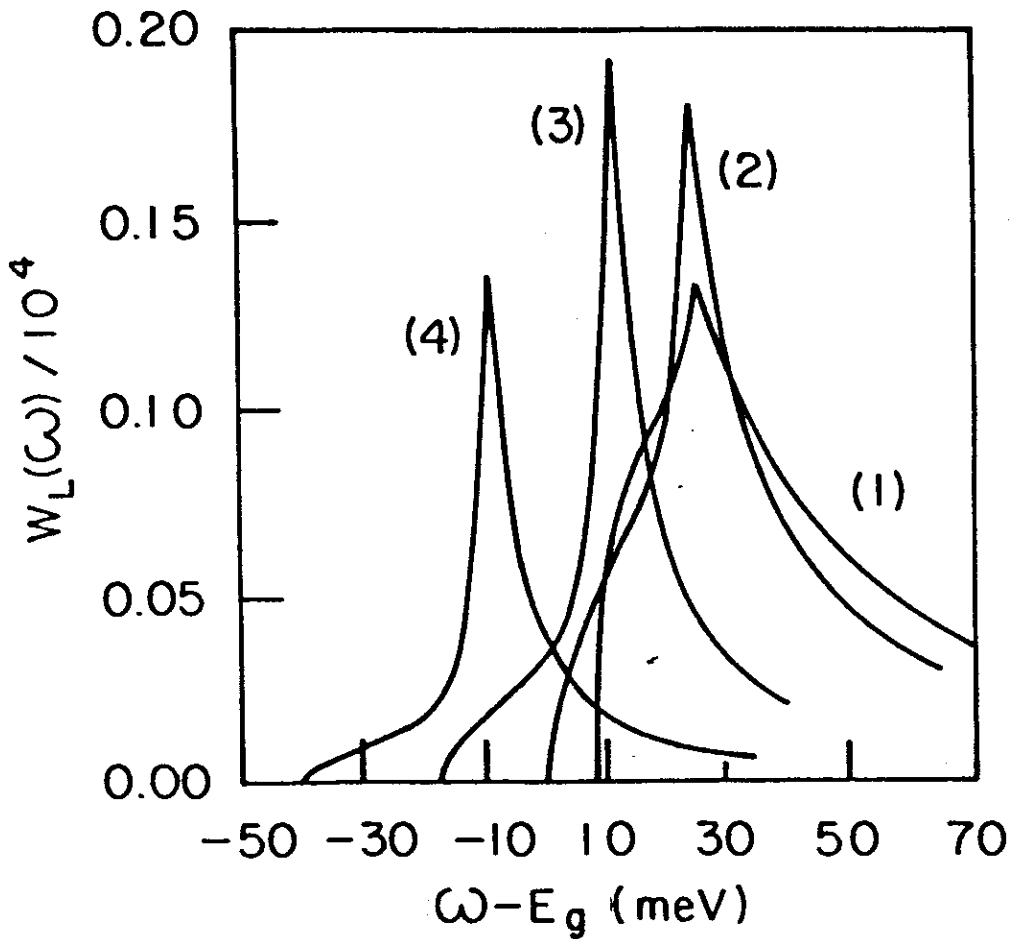


Figura 3.10

Espectro de absorção óptica relacionado a impurezas aceitadoras, em unidades de W_0 , sob a aplicação de campo elétrico externo para o poço quântico *finito* de GaAs – Ga_{0.7}Al_{0.3}As com largura $L=100 \text{ \AA}$. Os resultados são apresentados para campos elétricos de (1) $F=0$, (2) $F=50 \text{ kV/cm}$, (3) $F=100 \text{ kV/cm}$ e (4) $F=150 \text{ kV/cm}$.

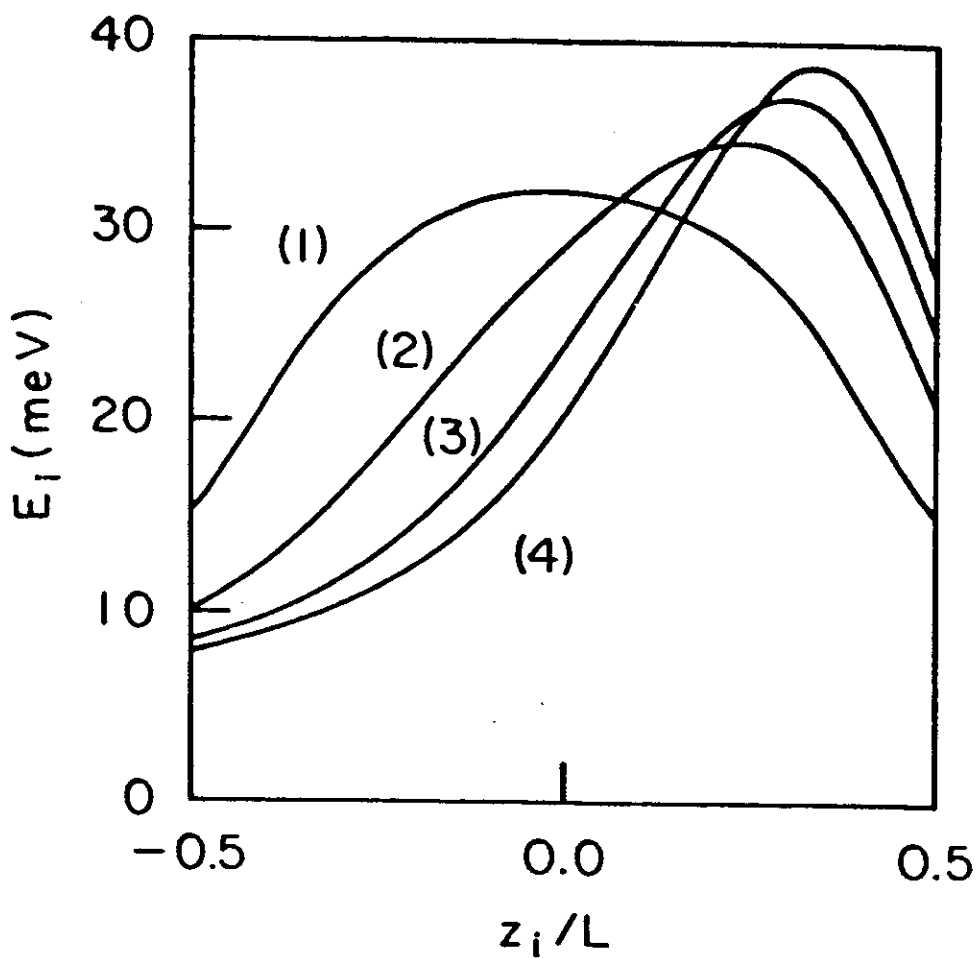


Figura 3.11

Energia de ligação dos aceitadores em função da posição das impurezas, para um poço quântico finito de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As, de largura $L=100 \text{ \AA}$, para os seguintes valores de campo elétrico aplicado: (1) $F=0$, (2) $F=50 \text{ kV/cm}$, (3) $F=100 \text{ kV/cm}$ e (4) $F=150 \text{ kV/cm}$.

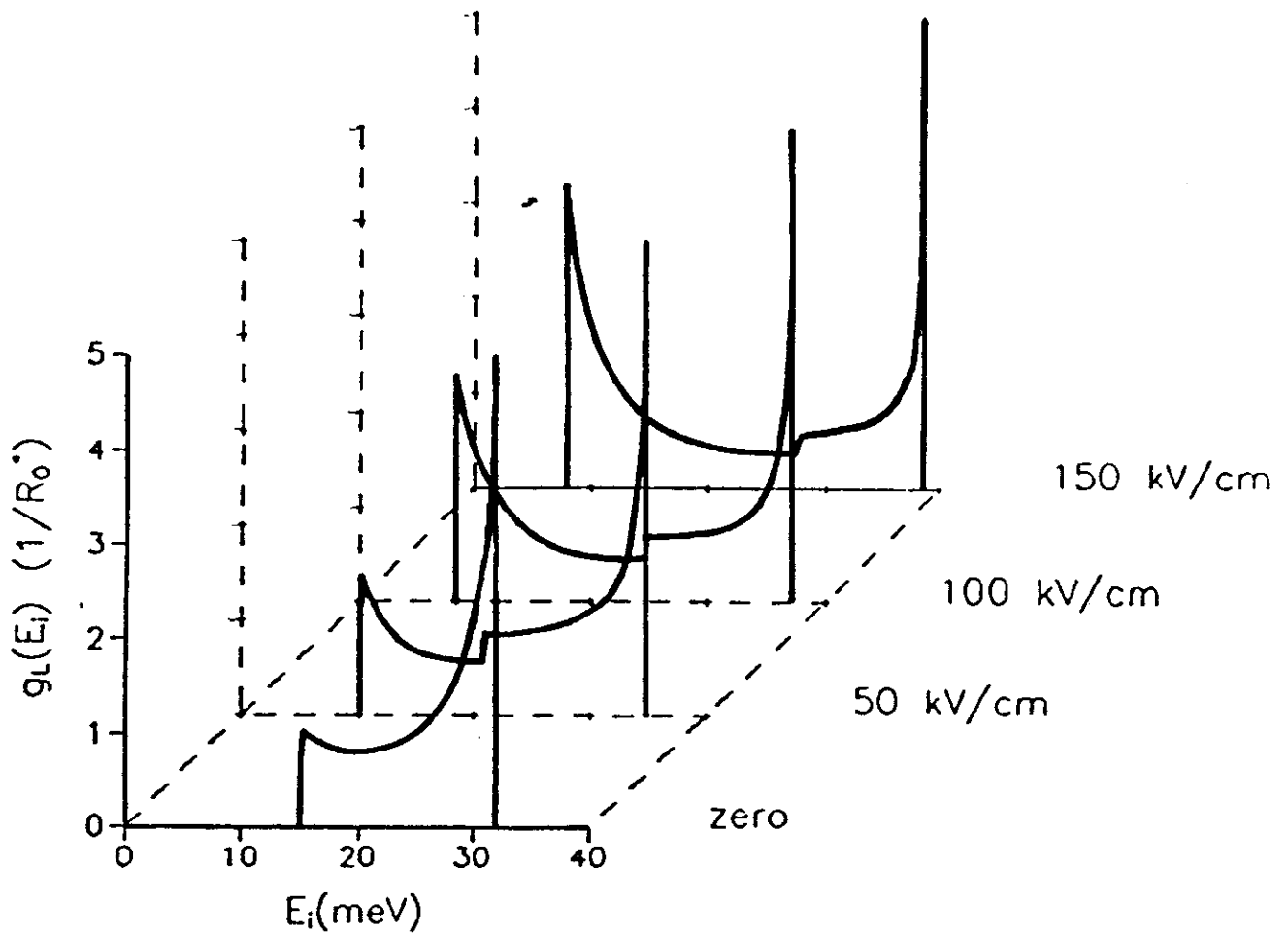


Figura 3.12

Densidade de estados das impurezas aceitadoras, para um poço quântico finito de GaAs-Ga_{0,7}Al_{0,3}As, de largura $L=100\text{Å}$, para os seguintes valores de campo elétrico aplicado: (1) $F=$ zero, (2) $F= 50\text{kV/cm}$, (3) $F= 100\text{kV/cm}$ e (4) $F= 150\text{kV/cm}$.

CAPÍTULO 4

Estudo da Fotoluminescência associada aos Aceitadores Rasos em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com Campo Elétrico Aplicado

4.1 Introdução

Os chamados *efeitos quânticos de tamanho* em heteroestruturas semicondutoras surgem quando as dimensões das camadas são comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie do elétron. As principais consequências destes efeitos são o confinamento de portadores elétricos em um poço de potencial e a formação de estados discretos de energia. Estes dois resultados tem sido extensivamente utilizados em estudos das propriedades das super-redes e em particular, na interpretação de experimentos de fotoluminescência (FL). Para poços quânticos não dopados de GaAs-(Ga,Al)As, a principal estrutura do espectro de FL tem sido atribuída a transições excitônicas entre os níveis fundamental ($n=1$) de elétrons e de buracos pesados⁽⁷⁸⁾. Os picos adicionais observados em alguns casos são interpretados como a recombinação de elétrons da sub-banda de condução com carbonos neutros que atuam como aceitadores⁽⁷⁸⁾.

Sob a influência de parâmetros externos, tal como o campo elétrico aplicado perpendicularmente as paredes do poço, os estados quânticos de energia sofrem deslocamentos devido a presença do campo elétrico e mudanças significativas na distribuição de carga dos portadores devem ocorrer.

O prévio conhecimento de propriedades ópticas e eletrônicas de heteroestruturas, tais como absorção óptica, condutividade elétrica, fotoluminescência etc, são extremamente importantes pois a partir destes conceitos muitas aplicações tornam-se possíveis, como por exemplo, o controle e modulação do sinal de saída da radiação dos dispositivos baseados em poços quânticos e super-redes.

Miller et.al^(78,79) fizeram medidas de fotoluminescência intrínseca e extrínsecas, ou seja, $n=1$ da sub-banda de condução para $n=1$ da sub-banda de valência e recombinação de elétrons $n=1$ com aceitadores neutros em poços quânticos de GaAs. Mostrou-se que em materiais dopados as intensidades dos picos de luminescência extrínsecos são comparáveis com os intrínsecos, não ocorrendo o mesmo nas amostras não dopadas pois neste caso os picos associados à FL intrínseca são bem maiores. além disto, o pico de FL extrínseca decresce em intensidade a medida que a largura do poço diminui. Mostrou-se que o comportamento das energias de ligação, que são determinadas a partir dos espectros de fotoluminescência, aumentam a medida que a largura do poço diminui. Estes resultados concordam com os cálculos teóricos apresentados por Bastard⁽³³⁾.

Mendez et. al⁽⁹⁵⁾ fizeram medidas de FL para poços quânticos múltiplos de GaAs-(Ga,Al)As (não dopados ou fracamente dopados com Si) sob a aplicação de campo elétrico externo, à baixas temperaturas. Os espectros mostram que a intensidade da FL decresce com o aumento do campo elétrico e os picos de energia são deslocados para energias mais baixas. Estes efeitos foram atribuídos a polarizações opostas nos elétrons e buracos provocadas pela presença do campo elétrico, e a consequente mudança nos níveis de energia das partículas confinadas no poço.

Miller e Gossard⁽⁷⁹⁾ realizaram medidas de FL intrínseca e extrínseca para poços quânticos múltiplos de GaAs-(Ga,Al)As, dopados com Be sob a ação de um campo elétrico aplicado longitudinalmente. Neste trabalho foi observado mudanças nas intensidades de maneira não uniforme com o campo elétrico externo, e pequenos deslocamentos nas energias dos picos associados a excitons e as impurezas.

Oliveira e Mahan⁽⁶⁰⁾ fizeram um estudo sistemático do espectro de FL associado as impurezas doadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As. Os resultados encontrados neste trabalho estão em perfeito acordo com medidas experimentais feitas por Liu et. al.⁽⁶¹⁾, onde é explorado o perfil das curvas de FL através de diferentes tipos de dopagens no poço.

Neste capítulo nós calcularemos os espectros de fotoluminescência associados à recombinação de elétrons da primeira sub-banda de condução com impurezas rasas aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com um campo elétrico aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura. O modelo que nós utilizaremos será baseado na aproximação da massa efetiva, e usaremos o método variacional para determinar as energias de ligação dos aceitadores e as funções de onda envelope.

4.2 Cálculo do Espectro de Fotoluminescência

O Hamiltoniano para impurezas rasas aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com campo elétrico \vec{F} aplicado paralelamente a direção de crescimento da heteroestrutura é dado pela equação (2.1). A massa efetiva usada para a banda de valência vale $m_v^* = 0.33m_0$ (m_0 é a massa do elétron livre) que relaciona-se com o valor da energia de ligação dos aceitadores no *bulk* do GaAs de 26meV^(68,97). Nós não levamos em conta o acoplamento das quatro bandas de valência⁽⁶⁶⁾. Para a banda de valência V_b é igual^(31,32) a

40% da descontinuidade do *gap* de energia dado pela expressão (2.12)⁽⁸⁵⁾. Consideramos as massas efetivas e as constantes dielétricas ($\epsilon=13.1$)⁽⁸⁷⁾ como sendo as mesmas ao longo das interfaces. O campo \vec{F} é o campo elétrico interno, ou seja fora do poço pode ser considerado nulo, de tal forma que desprezamos os efeitos de tunelamento.

A energia e a função de onda do estado fundamental serão obtidas aproximadamente através de um procedimento variacional. A nossa escolha para a função de onda tentativa será dada pela equação (3.1). Pelos mesmos motivos que foram expostos na introdução do capítulo 3, neste trabalho também usaremos uma função de onda hidrogenóide contendo apenas um parâmetro variacional, veja eq.(3.2). A energia de ligação das impurezas aceitadoras é dada pela equação (3.4).

A probabilidade de transição por unidade de tempo $W_L(L, z_i)$ da banda de condução para a banda de impurezas aceitadoras (associada a uma única impureza situada em $z = z_i$), é obtida através do elemento de matriz da interação elétron-fóton entre as funções de onda do estado inicial, neste caso a sub-banda de condução $n=1$, e estado final de aceitadores, como pode ser visto através das expressões (3.10) à (3.22).

Nós consideramos $n_A(z_i)$ como sendo a densidade de impurezas aceitadoras não interagentes por unidade de volume e suporemos que elétrons foram oticamente injetados na banda de condução e posteriormente recombinados com buracos na banda de aceitadores ou na banda de valência. A figura 4.1 representa esquematicamente este processo.

Como iremos calcular os espectros de fotoluminescência associados à recombinação de buracos na banda de aceitadores, nós consideraremos que a temperatura do sistema é suficientemente baixa ($T \ll 300$ K) tal que cada estado aceitador esteja preenchido com um buraco.

O espectro de fotoluminescência por unidade de tempo e por unidade de volume associado às transições da primeira sub-banda de condução para a banda de aceitadores neutros é escrito como

$$L(\omega) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dz_i n_A(z_i) W_L(z_i, \omega) f(\epsilon_k), \quad (4.1)$$

com

$$f(\epsilon_k) = \frac{1}{\left\{ 1 + \exp\left[(\hbar\omega - \epsilon_k + E_i - E_F) / k_B T \right] \right\}}, \quad (4.2)$$

sendo o número de ocupação de Fermi do gás de elétrons da sub-banda de condução, k_B é a constante de Boltzmann, e E_F é a quase-energia de Fermi (medida a partir da borda da primeira sub-banda de condução) do gás de elétrons livres no estado estacionário de quase-equilíbrio.

4.3 Resultados e Discussão

As figuras 4.2 e 4.3 mostram os resultados dos espectros de fotoluminescência para a recombinação de aceitadores num poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As, para $L=100\text{\AA}$, temperatura $T=5\text{K}$, para níveis de Fermi $E_F = -1\text{meV}$ e 1meV , e para diferentes valores de campo elétrico aplicado $F=0, 50, 100$ e 150 kV/cm . A menos que seja mencionado, estamos considerando uma distribuição homogênea de impurezas dentro do poço, isto é, $n_A(z_i) = 1$. A quase-energia de Fermi associada ao gás de elétrons livres na sub-banda de condução deve ser calculada através de uma equação de balanço para densidade de portadores num estado de quase equilíbrio⁽⁹⁶⁾. Resultados⁽⁹⁶⁾ indicam que para baixas temperaturas (menores que 10K) a quase-energia de Fermi entorno de 1meV para um laser com intensidade alta ($\approx 10^4\text{ W/cm}^2$), e para um laser com intensidade baixa é da ordem de -1meV . Nestas condições, as características principais dos espectros de fotoluminescência associados à recombinação de impurezas aceitadoras não são muito sensíveis à mudanças

no valor de E_F , somente as intensidades alteram-se devido à variações nas densidades de portadores.

Os espectros são essencialmente caracterizados pela presença de três estruturas (vide figura 4.2): um pico associado à transições de aceitadores que possuem energias de ligação no topo da banda de impurezas, e duas estruturas do tipo singularidades de van-Hove, relacionadas a aceitadores situados na borda direita e na borda esquerda do poço quântico. As energias de ligação associadas a estas estruturas podem ser obtidas se considerarmos os deslocamentos das energias em relação a diferença de energia entre a banda de condução e a banda de valência, pois sabemos que as transições obedecem a seguinte expressão $\hbar\omega - E_g = E_c + E_v - be(z_i)$. As energias de ligação associadas a estas três estruturas são apresentadas na Fig.4.4 como função do campo elétrico aplicado. Podemos ver que para as impurezas situadas em $z_i = L/2$ a energia ligação aumenta proporcionalmente com o campo elétrico enquanto efeito inverso ocorre com aquelas impurezas situadas em $z_i = -L/2$, e a energia de ligação associada as impurezas posicionadas no topo da banda de impurezas se mantêm praticamente constante para qualquer valor de campo elétrico. Experimentalmente, resultados de fotoluminescência extrínseca para impurezas doadoras e aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As foram obtidos^(78,80,61,92) na ausência do campo elétrico aplicado. Miller e Gossard⁽⁷⁹⁾ obtiveram os efeitos do campo elétrico sobre os espectros de fotoluminescência associados as impurezas, entretanto, em seu trabalho, não ficam claras as condições em que o campo elétrico se encontra.

Na medida em que a temperatura da amostra é reduzida, a distribuição de energia na sub-banda de condução se torna mais estreita, e como consequência as estruturas no espectro de fotoluminescência ficam mais definidas. Este efeito pode ser apreciado na Fig.4.5, que mostra resultados para um poço de GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As de largura $L = 50 \text{ \AA}$, quase-energia de Fermi $\epsilon_F = 1 \text{ meV}$, campo elétrico interno $F = 50 \text{ kV/cm}$, e temperaturas $T = 1$ e 5 K .

Quando consideramos larguras distintas do poço quântico, observamos mudanças significativas nos espectros de fotoluminescência associadas à recombinação de impurezas aceitadoras. Nas figuras 4.6 e 4.7 são encontrados resultados para um poço de GaAs – Ga_{0,7}Al_{0,3}As de largura $L=100 \text{ \AA}$, quase-energia de Fermi $E_F = -1$ e 1 meV , temperatura $T=5 \text{ K}$, e para diferentes valores de campo elétrico interno $F=0, 50, 100$ e 150 kV/cm . A medida que o campo elétrico aumenta, as estruturas relacionadas com as transições dos aceitadores situados na borda direita do poço e para aqueles que estão no topo da banda de impurezas vão gradativamente diminuindo (veja Fig.4.1). De fato, para $F=100$ e 150 kV/cm , as singularidades do tipo van-Hove associadas as impurezas localizadas na borda direita do poço já desapareceram.

Na figura 4.8, são apresentados espectros de fotoluminescência relacionado à recombinação de aceitadores em poços quânticos de GaAs – Ga_{0,7}Al_{0,3}As de largura $L=100 \text{ \AA}$, para $T=5 \text{ K}$, $F=50$ e 150 kV/cm e $E_F = -1 \text{ meV}$. Estes resultados são para poços dopados pela metade e com uma distribuição homogênea de impurezas, a curva da esquerda corresponde a primeira metade do poço dopada enquanto a da direita corresponde a segunda metade. Observa-se que devido a assimetria na distribuição de impurezas dentro do poço quântico, o espectro de fotoluminescência na presença de um campo elétrico aplicado apresenta características diferentes daquelas que foram expostas nas figuras anteriores. Como consequência da dopagem considerada, a média dos resultados da primeira metade dopada do poço com a segunda metade é igual aos espectros de fotoluminescência previamente mostrados (veja fig.4.6 e fig.4.7).

Apresentamos um estudo sistemático do espectro de fotoluminescência relacionada a recombinação de impurezas aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As submetido a um campo elétrico externo e constante. A forma das curvas de fotoluminescência dos aceitadores dependem diretamente da intensidade do campo elétrico aplicado, da temperatura, da quase energia de Fermi do gás de elétrons na banda de condução e da distribuição de aceitadores ao longo do poço quântico. Nós mostramos que

as formas das curvas do espectro de fotoluminescência, para uma dopagem uniforme de impurezas, são essencialmente caracterizado pela presença de três estruturas, são elas: um pico associado a transições que envolvem aceitadores no topo da banda de impurezas, e duas singularidades do tipo de van-Hove que estão relacionados as transições de aceitadores para as bordas do poço quântico.

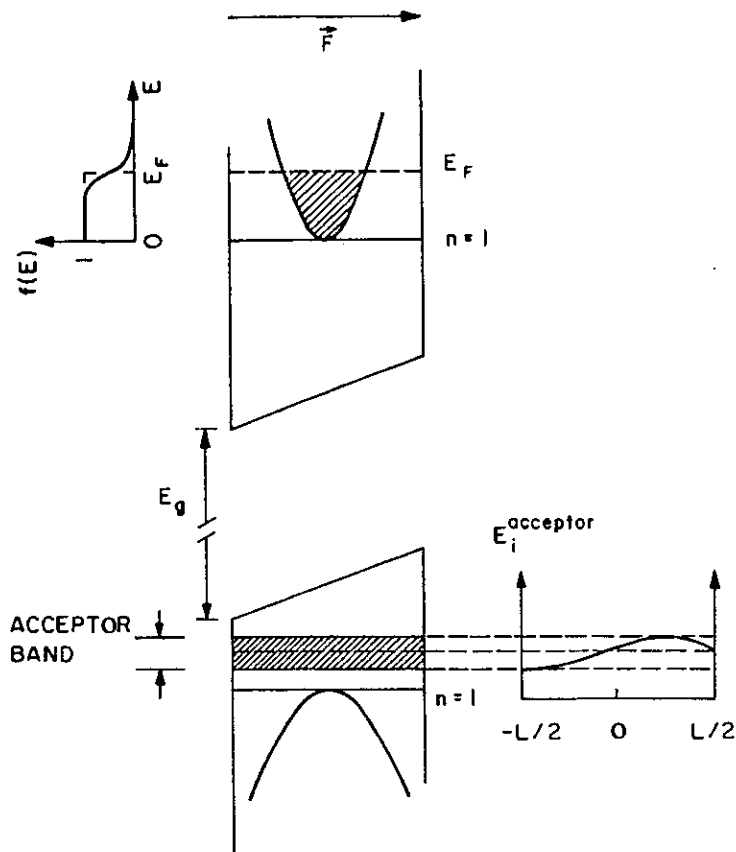


Figura 4.1

Representação esquemática do poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As com banda de impurezas aceitadoras e submetido a um campo elétrico constante. As parábolas representam uma visão pictórica da relação de dispersão de $\bar{k}_{||}$ para as sub-bandas de valência e de condução. Também estão representados a função distribuição de Fermi para um gás de elétrons (à esquerda), e a dependência da energia de ligação com a posição da impureza (à direita).

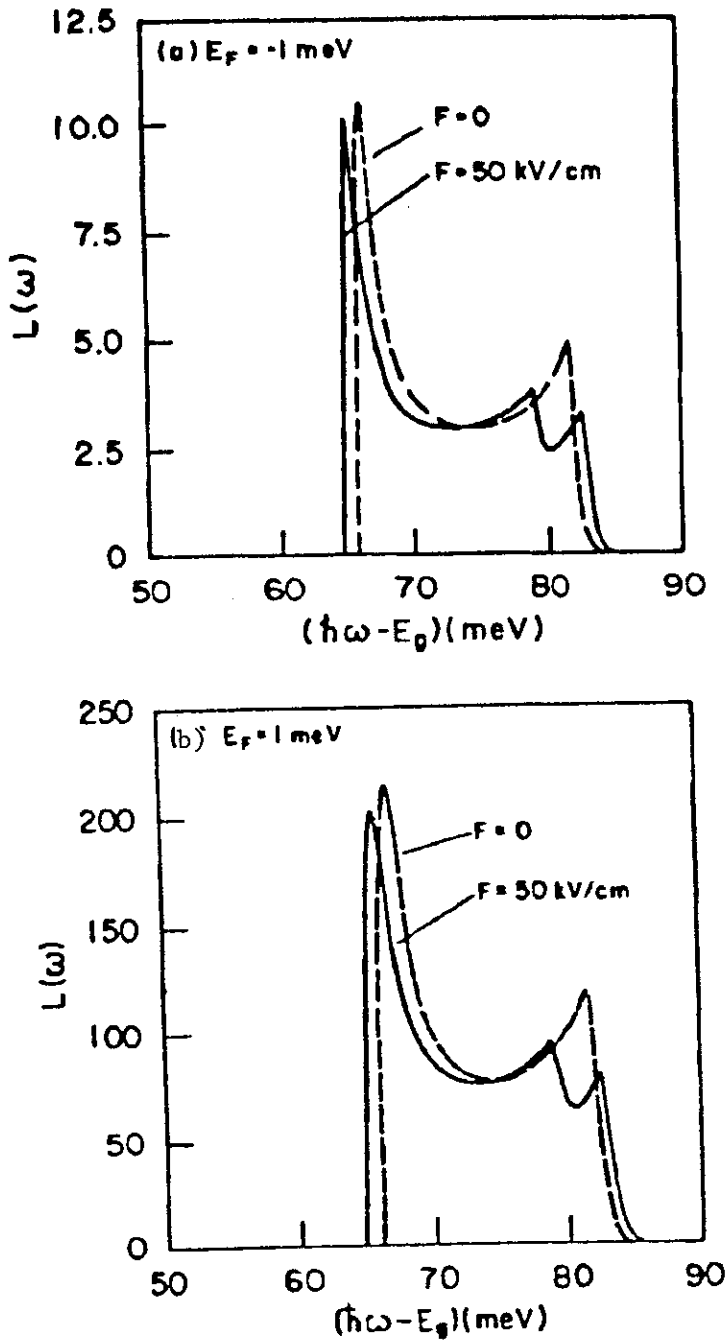


Figura 4.2

Espectros de fotoluminescência relacionado a recombinação de $e-A^0$ (em unidades de W_0 , veja no texto, com A^0 sendo aceitador neutro) para um poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As com largura $L=50\text{Å}$, a temperatura $T=5\text{ K}$ e para campos elétricos $F=0$ e 50 kV/cm . (a) $E_F = -1\text{ meV}$ e (b) $E_F = 1\text{ meV}$.

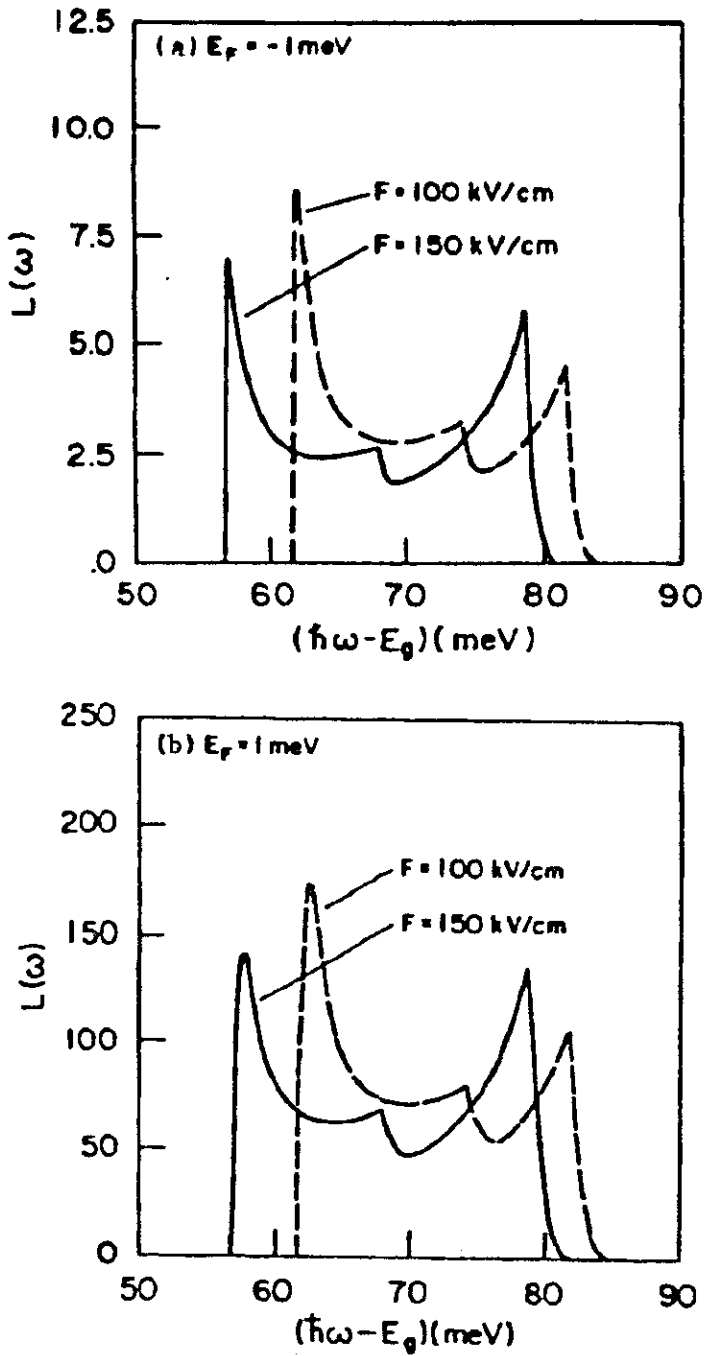


Figura 4.3

Espectros de fotoluminescência relacionados a recombinação $e-A^0$ (em unidades de W_0 , veja no texto) para um poço quântico de $\text{GaAs-Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ com largura $L=50\text{\AA}$, temperatura $T=5 \text{ K}$ e para campos elétricos $F= 100$ e 150 kV/cm . (a) $E_F = -1\text{meV}$ e (b) $E_F = 1\text{meV}$.

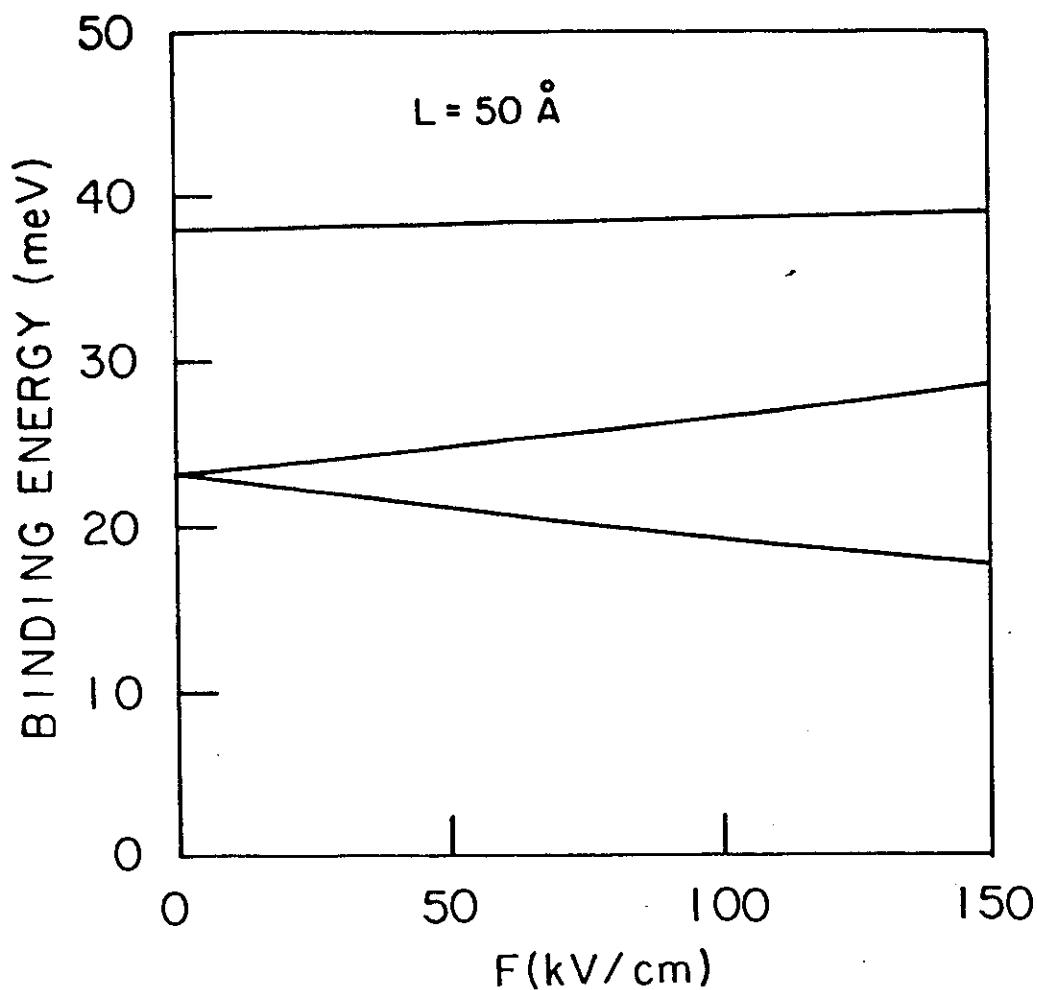


Figura 4.4

Energias de ligação para aceitadores, correspondentes as estruturas dos espectros de fotoluminescência apresentados nas figuras 4.2 e 4.3, em função do campo elétrico aplicado F , para largura $L=50 \text{ \AA}$ e $E_F = -1 \text{ meV}$

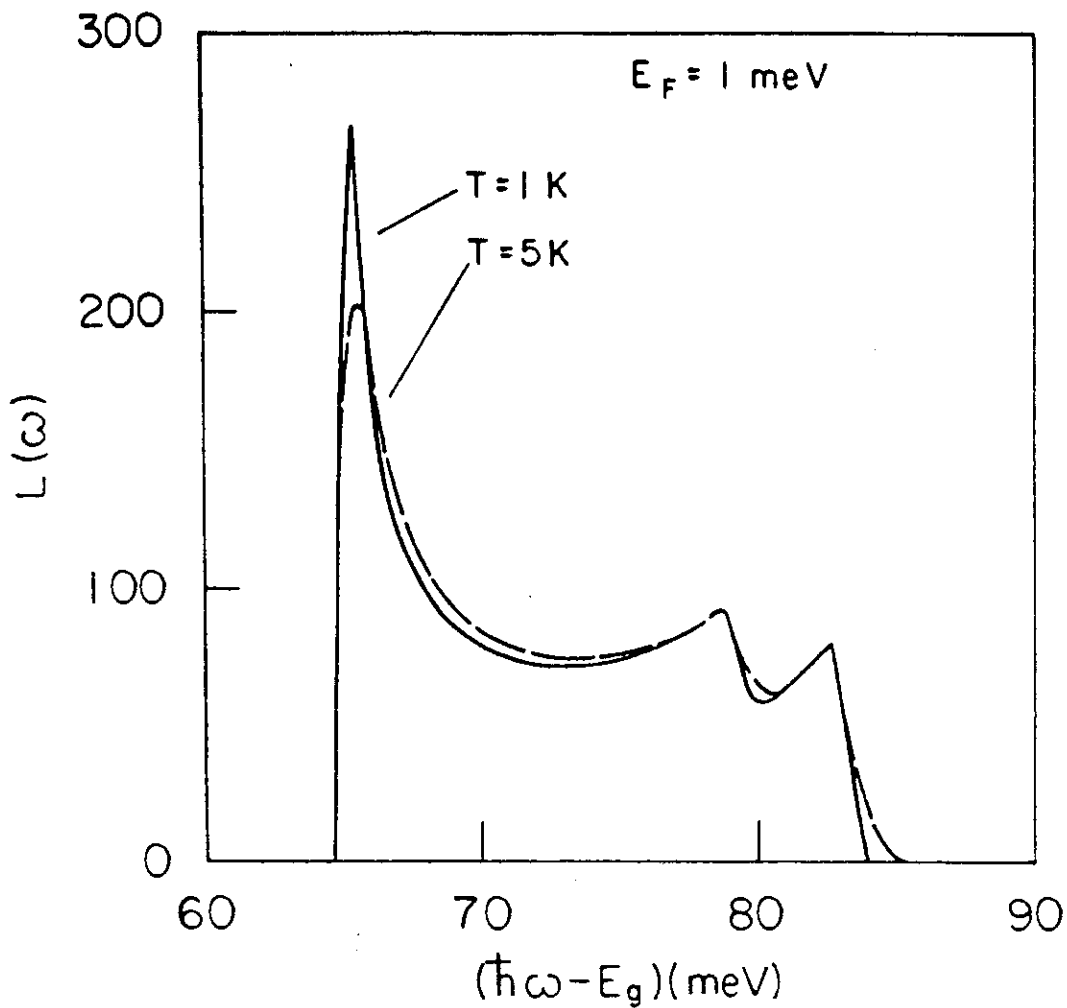


Figura 4.5

Curvas de fotoluminescência (em unidades de W_0 , veja texto) associadas a recombinação elétron-aceitador para um poço quântico de GaAs-Ga_{0,7}Al_{0,3}As com $L=50\text{ \AA}$, $E_F = 1\text{ meV}$, $F=50\text{ kV/cm}$, e temperaturas $T=1\text{ K}$ (linha sólida) e $T=5\text{ K}$ (linha tracejada).

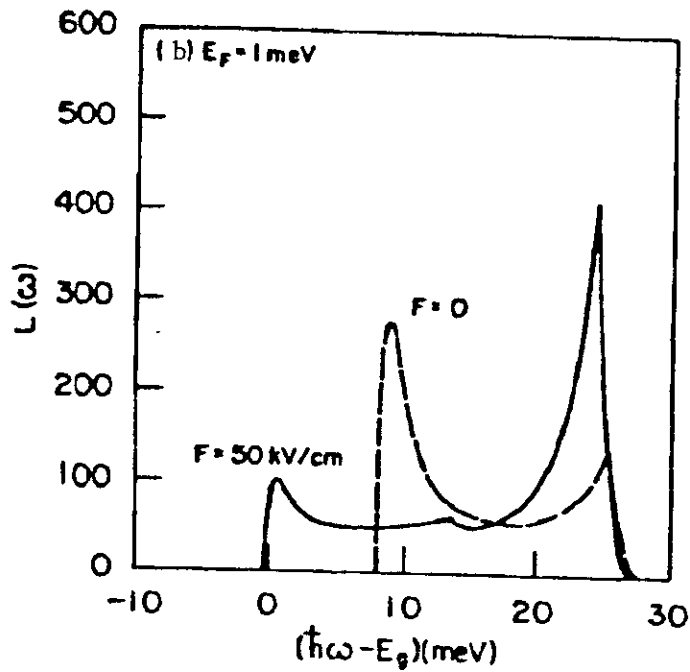
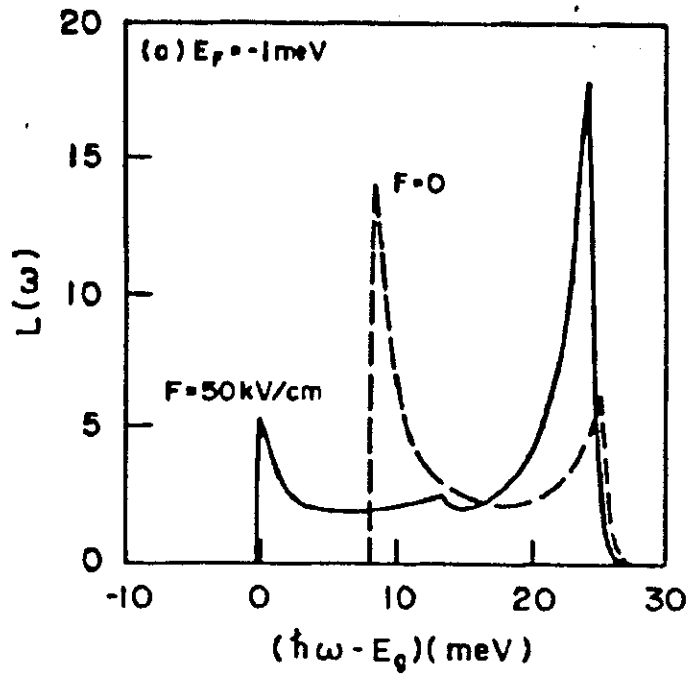


Figura 4.6

Espectros de fotoluminescência relacionado a recombinação $e-A^0$ (em unidades de W_0 , veja no texto) para um poço quântico de $\text{GaAs}-\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ com largura $L=100 \text{ \AA}$, temperatura $T=5 \text{ K}$ e para campos elétricos $F=0$ e 50 kV/cm . (a) $E_F = -1 \text{ meV}$ e (b) $E_F = 1 \text{ meV}$.

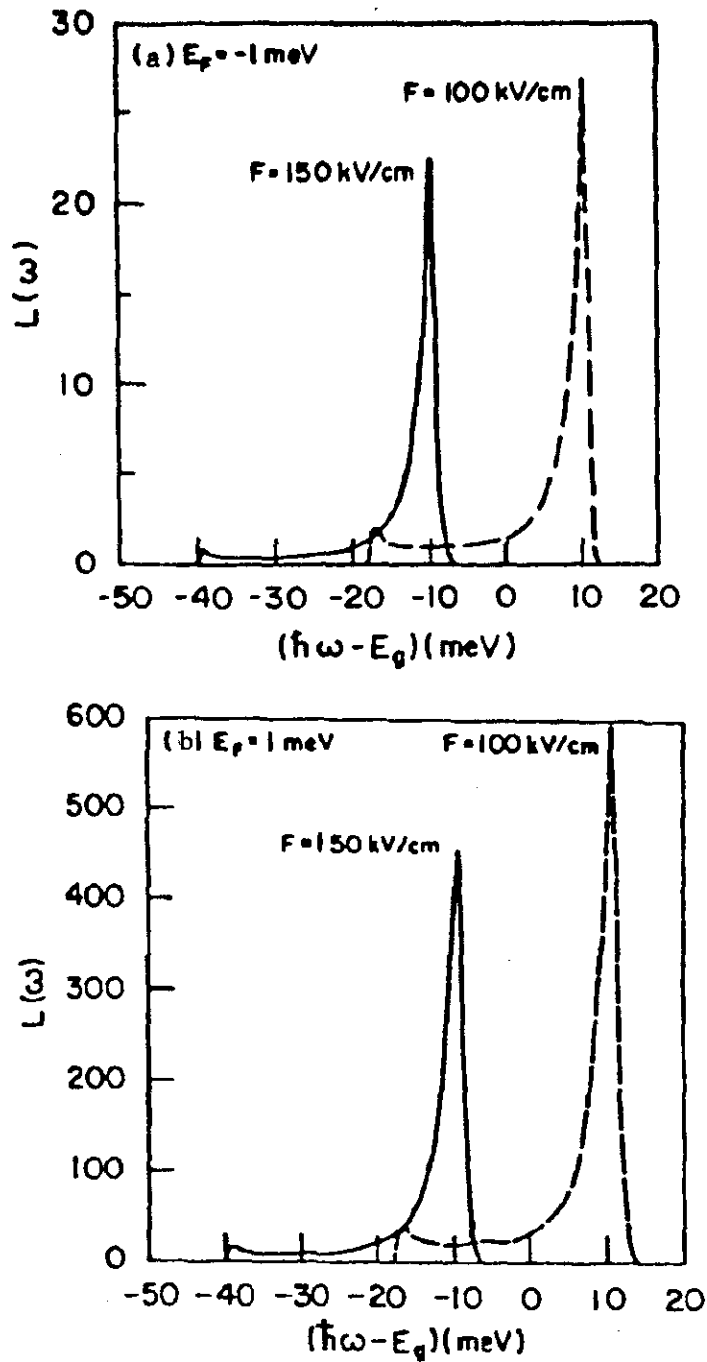


Figura 4.7

Espectros de fotoluminescência relacionado a recombinação $e-A^0$ (em unidades de W_0 , veja no texto) para um poço quântico de $\text{GaAs}-\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ com largura $L=100\text{\AA}$, temperatura $T=5 \text{ K}$ e para campos elétricos $F= 100$ e 150 kV/cm . (a) $E_F = -1\text{meV}$ e (b) $E_F = 1 \text{ meV}$

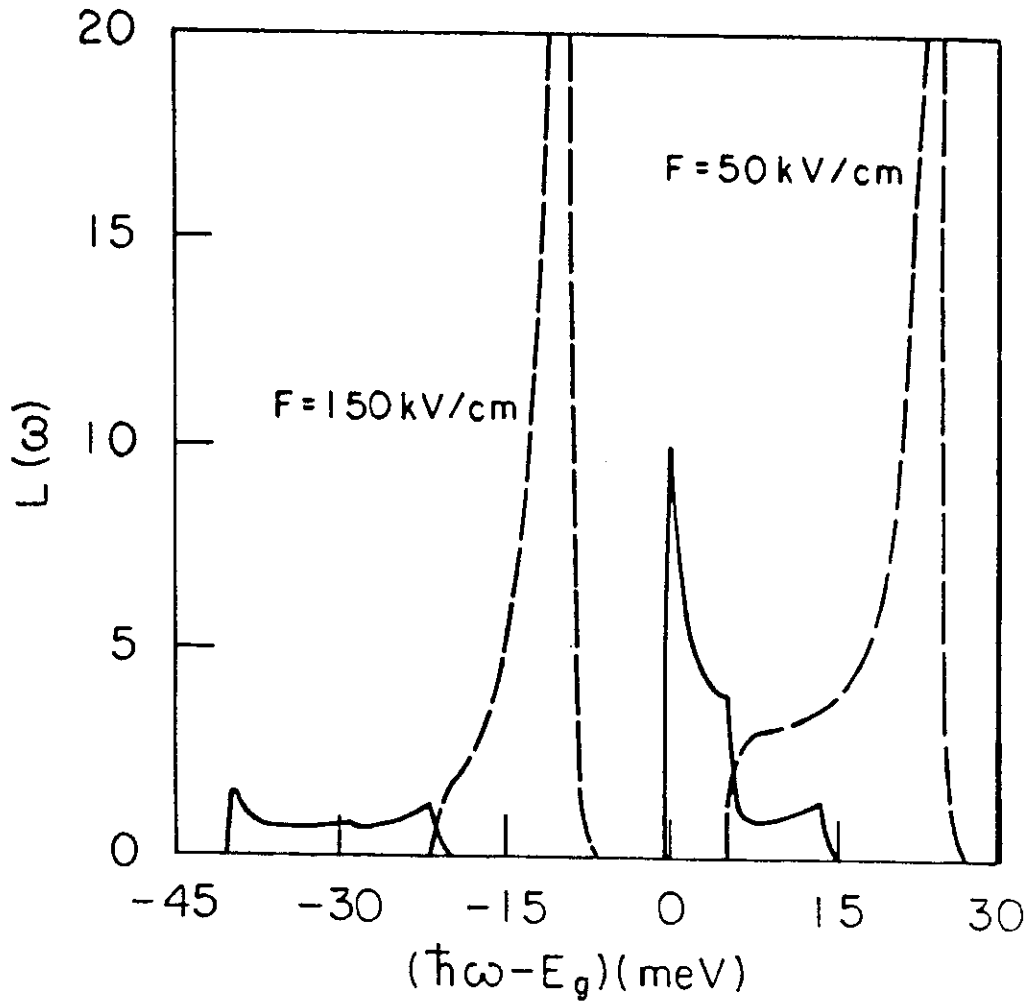


Figura 4.8

Espectros de fotoluminescência relacionado a recombinação $e-A^0$ (em unidades de W_0 , veja no texto) para um poço quântico de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As com $L=100\text{\AA}$, $T=5\text{K}$ e $E_F = -1\text{ meV}$, para diferentes perfis de dopagem e campos elétricos aplicados; curva contínua (tracejada) corresponde a metade esquerda (direita) do poço dopada.

CAPÍTULO 5

Análise do Estado Fundamental de Impurezas Rasas em Poços Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As

5.1 Introdução

O estudo dos estados de impurezas hidrogenóides em heteroestruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade tais como: poços quânticos, fios de poços quânticos e pontos de poços de quânticos tem recebido bastante atenção na última década. Espectros teóricos de fotoluminescência⁽⁶⁰⁾ relacionados com impurezas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As, encontram-se em bom acordo com resultados experimentais⁽⁶¹⁾. Cálculos recentes apresentados por Fraizzoli e Pasquarello⁽⁹⁸⁾, mostram-se em excelente acordo com medidas experimentais de fotoluminescência e espalhamento Raman ressonante obtidas por Holtz et al.⁽⁹⁹⁾.

Greene e Bajaj⁽⁴²⁾ calcularam as energias de transição do estado fundamental e dos primeiros estados excitados de impurezas hidrogenóides em poços quânticos, para diferentes valores de alturas de barreiras e larguras de poços, assim como sob a influência de campo magnético externo⁽⁴⁹⁾.

No capítulo 2, numa tentativa de encontrar um estado fundamental mais baixo do sistema poço quântico com impurezas rasas na presença de campo elétrico, nós

propussemos uma função de onda hidrogenóide tipo-s com dois parâmetros variacionais, aumentando assim o grau de liberdade quanto a forma desta, de modo a descrever melhor a distribuição de carga eletrônica associada as impurezas no poço quântico. Essencialmente, o que foi visto, é que realmente ocorre uma pequena melhora no valor da energia do estado fundamental do sistema, mas que este efeito sobre as propriedades ópticas é um leve deslocamento dos espectros ópticos para energias menores. No presente capítulo nós também analisamos o cálculo da energia de ligação associada ao estado fundamental de doadores em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As. Porém desta vez, o nosso tratamento será baseado no trabalho de Faulkner⁽¹⁰⁰⁾, onde foi utilizado um método variacional na aproximação da massa efetiva para o cálculo dos estados de energia de doadores no Silício e no Germânio e cuja a função de onda tentativa é expandida num conjunto de funções de onda hidrogenóides ortonormalizadas. No nosso trabalho usaremos o método variacional^(81,84) na aproximação da massa efetiva e a nossa função de onda tentativa será contruída como uma combinação linear de produtos de funções de onda da solução do estado fundamental do poço pelas funções de onda hidrogenóides 1s e 2s. Para simplificar o problema, à princípio, faremos a aproximação de poço quântico infinito e não incluiremos os efeitos do campo elétrico.

5.2 Cálculo da Energia

O Hamiltoniano na aproximação da massa efetiva (sem campo elétrico aplicado) é escrito como:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_b + V_h(r) \quad (5.1)$$

$$V_b = \begin{cases} 0, & |z| \leq L/2 \\ \infty, & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (5.2)$$

onde,

$$V_b(r) = \frac{-e^2}{\epsilon r} \quad (5.3)$$

tal que, $r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$

O centro do poço quântico é tomado na origem de z que é a direção de crescimento da heteroestrutura. A borda da primeira banda de condução do GaAs é definida como origem da energia e L é a largura do poço quântico.

O terceiro termo da eq.(5.1) é o potencial coulombiano atrativo relativo à impureza hidrogenóide localizada em z_i e $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a distância radial do portador ao sítio da impureza. Tanto a constante dielétrica ϵ quanto a massa efetiva m^* do doador são tomadas como constantes ao longo da heteroestrutura e valem $13.1^{(31)}$ e $0.0665m_0$, respectivamente, m_0 é a massa do elétron livre. Nossos resultados serão dados em unidades efetivas (veja apêndice A).

A função de onda tentativa é escrita como

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^2 a_n \chi_{n(\ell=0)}(\vec{r}) \quad (5.4)$$

$$\chi_{n(\ell=0)}(\vec{r}) = \Phi_0(z) \varphi_n \{ \vec{r}, \lambda_{1s}, \lambda_{2s}, \beta_{2s} \} \quad (5.5)$$

Nós consideramos estados de impurezas possuindo números quânticos principal $n=1$ e 2 e esféricamente simétricos ($\ell = 0$) e sendo $\lambda_{1s}, \lambda_{2s}, \beta_{2s}$ os parâmetros variacionais.

A função de onda para o estado fundamental de uma partícula confinada em um poço infinito de largura L é dada por:

$$\Phi_0(\vec{r}) = \begin{cases} \cos(k_1 z) & , -L/2 \leq z \leq L/2 \\ 0 & , |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (5.6)$$

onde,

$$k_1 = \sqrt{2m^*E_1 / \hbar^2} = \pi/L \quad (5.7)$$

As funções de onda hidrogenóides do estado fundamental (1s) e do primeiro estado excitado (2s) das impurezas são escritas como

$$\varphi_{1s}(\vec{r}) = \exp(-r/\lambda_{1s}) \quad (5.8)$$

$$\varphi_{2s}(\vec{r}) = \{1 - \beta_{2s}r\} \exp(-r/\lambda_{2s}) \quad (5.9)$$

Por outro lado, H atuando em (5.4), e observando a não ortogonalidade das funções de onda, obtemos o seguinte sistema homogêneo de equações:

$$\begin{pmatrix} H_{11} - \epsilon & H_{12} - \epsilon S_{12} \\ H_{12} - \epsilon S_{12} & H_{22} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (5.10)$$

onde $H\Psi \equiv \epsilon\Psi$ e também definimos,

$$\begin{aligned} H_{mn'} &= \langle \chi_{ns} | H | \chi_{n's} \rangle \\ S_{mn'} &= \langle \chi_{ns} | \chi_{n's} \rangle \end{aligned} \quad (5.11)$$

A solução não trivial do sistema acima implica que as energias permitidas são:

$$\epsilon_{1,2}(\lambda_{1s}, \lambda_{2s}, \beta_{2s}) = \frac{(H_{11} + H_{22} - 2H_{12}S_{12})}{2(1 - S_{12}^2)} \pm \sqrt{\frac{(2H_{12}S_{12} - H_{11} - H_{22})^2}{4(1 - S_{12}^2)^2} - \frac{(H_{11}H_{22} - H_{12}^2)}{(1 - S_{12}^2)}} \quad (5.12)$$

Na expressão acima, minimizamos a solução de mais baixa energia ϵ_1 , em relação aos três parâmetros variacionais que são determinados simultaneamente. Uma vez obtidos os

parâmetros ótimos, estes são substituídos na expressão (5.12). A energia mais baixa ε_1 é a estimativa variacional para o estado fundamental do sistema.

A energia de ligação associada ao estado fundamental das impurezas doadoras no poço quântico é definida como

$$E_i(z_i, L) = E_0 - \varepsilon_1(\lambda_{1s}, \lambda_{2s}, \beta_{2s}) \quad (5.13)$$

onde E_0 é a energia do estado fundamental do poço quântico.

5.3 Resultados e Discussão

A figura 5.1 apresenta resultados da energia de ligação associada ao estado fundamental de doadores num poço quântico infinito em função da posição da impureza no poço, para largura de poço $L=100\text{Å}$. Comparamos nosso resultado (curva cheia) com aquele cujo cálculo do estado fundamental da impureza num poço quântico é desacoplado do primeiro estado excitado e neste caso a matriz (5.10) reduz-se apenas a um elemento.

Como pode ser visto, fica evidente que, apesar de termos adotado um processo mais refinado para obtenção do estado fundamental, não houve melhora significativa neste cálculo, uma vez que as curvas de energias de ligação apresentadas nesta figura praticamente coincidem, levando a crer que as funções de onda que formam a base tipo 1s e 2s hidrogenóides multiplicadas pelo estado fundamental do poço quântico sem o potencial da impureza quase não se misturam, mesmo para poços de larguras não muito elevadas.

Os parâmetros variacionais utilizados para se obter estas energias são apresentados (em unidades reduzidas) na figura 5.2, a) $\lambda_{1s}, \lambda_{2s}$ e β , estes parâmetros são obtidos

simultaneamente através da minimização ε_1 (5.12) e estão associados a curva cheia da fig.5.1, b) λ'_{1s} está relacionado com a curva pontilhada da fig.5.1.

Para poços de larguras grandes, a energia de ligação reproduz o valor do *bulk* do GaAs, R_0^* . A figura 5.3 mostra este efeito para poço de largura $L=5000\text{Å}$. A figura 5.4 apresenta os parâmetros variacionais que foram utilizados no cálculo desta energia de ligação em unidades reduzidas. Vale observar, que estes tendem para os valores encontrados nas funções de onda do átomo de hidrogênio, que em unidades reduzidas assumem os valores $\lambda_{1s}=1.0$, $\lambda_{2s}=2.0$ e $\beta_{2s}=0.5$, especialmente para as impurezas situadas longe das bordas do poço.

Nossos resultados estão de acordo com os encontrados por Faulkner⁽¹⁰⁰⁾, que mostram que para o cálculo da energia do estado fundamental pode-se considerar que os termos fora da diagonal na matriz (5.10) não são relevantes.

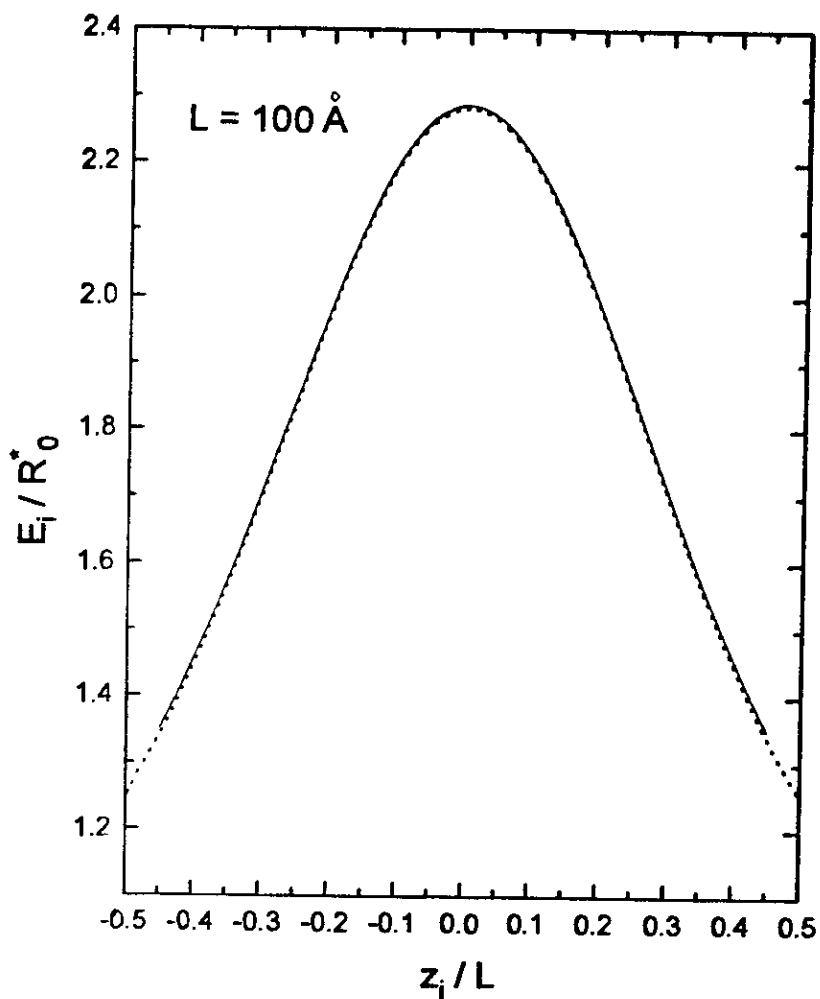


Figura 5.1

Energia de ligação associada ao estado fundamental de impurezas doadoras em função da posição da impureza num poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As infinito de largura $L=100 \text{ \AA}$. A curva cheia corresponde ao resultado encontrado neste trabalho (matriz 2×2) e a curva pontilhada associada ao cálculo do tipo adotado nos capítulos anteriores.

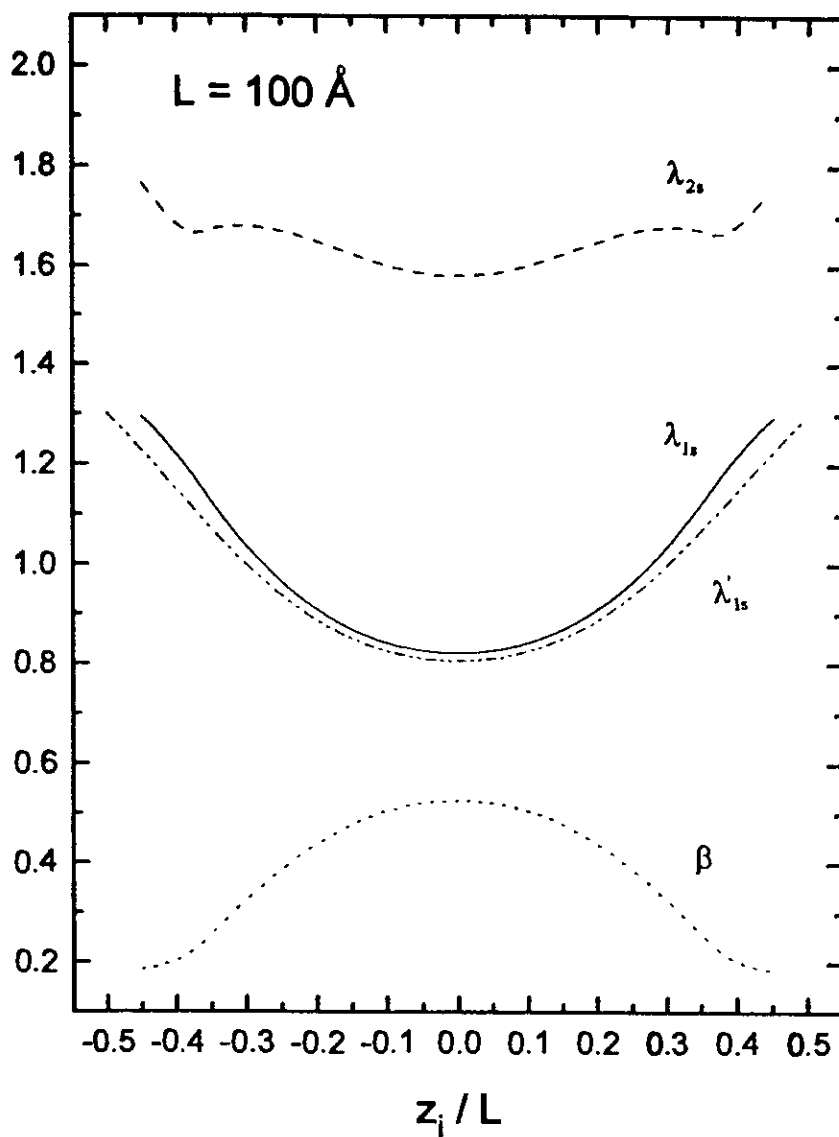


Figura 5.2

Parâmetros variacionais usados para obter as energias de ligação apresentas no gráfico anterior a) $\lambda_{1s}, \lambda_{2s}$ e β , b) λ'_{1s} associados a curva cheia e a curva pontilhada, respectivamente.

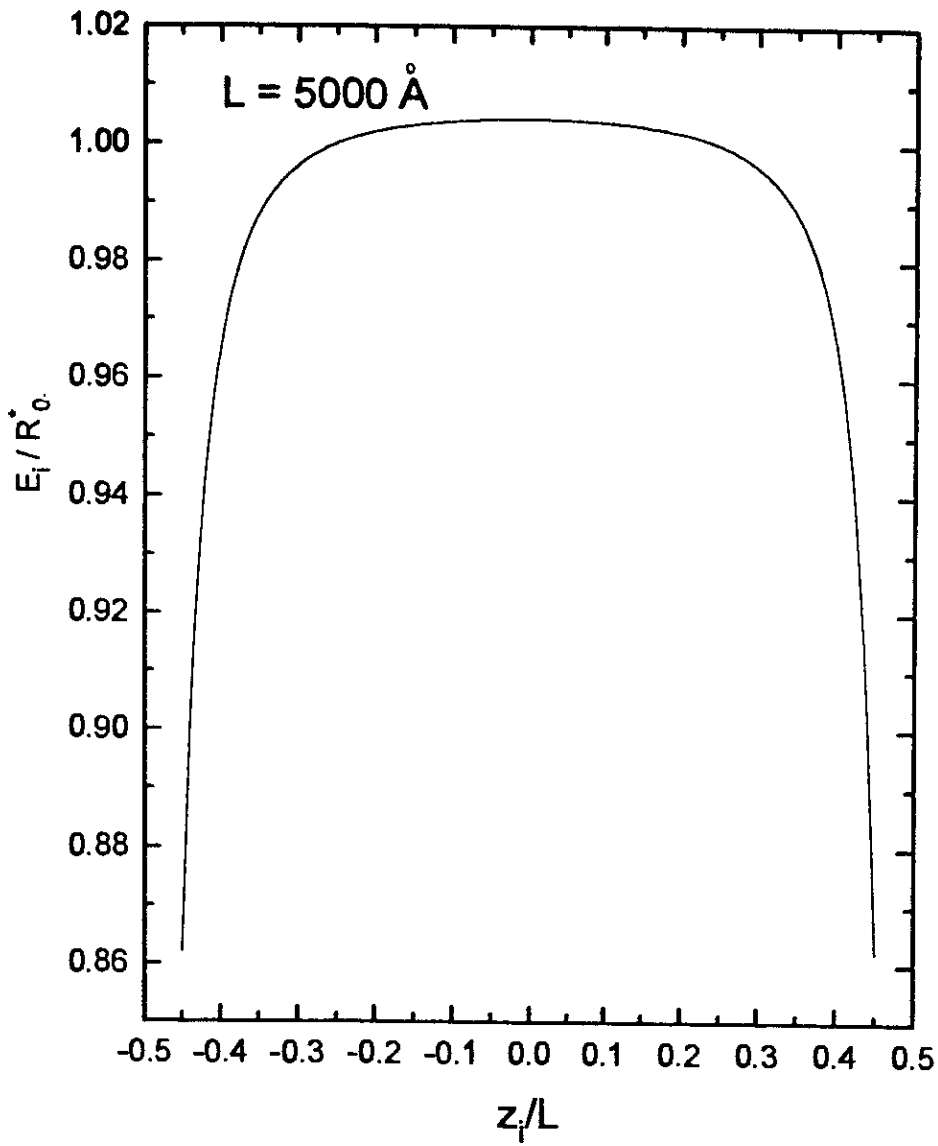


Figura 5.3

Energia de ligação associada ao estado fundamental de impurezas doadoras, para largura de poço $L=5000\text{\AA}$.

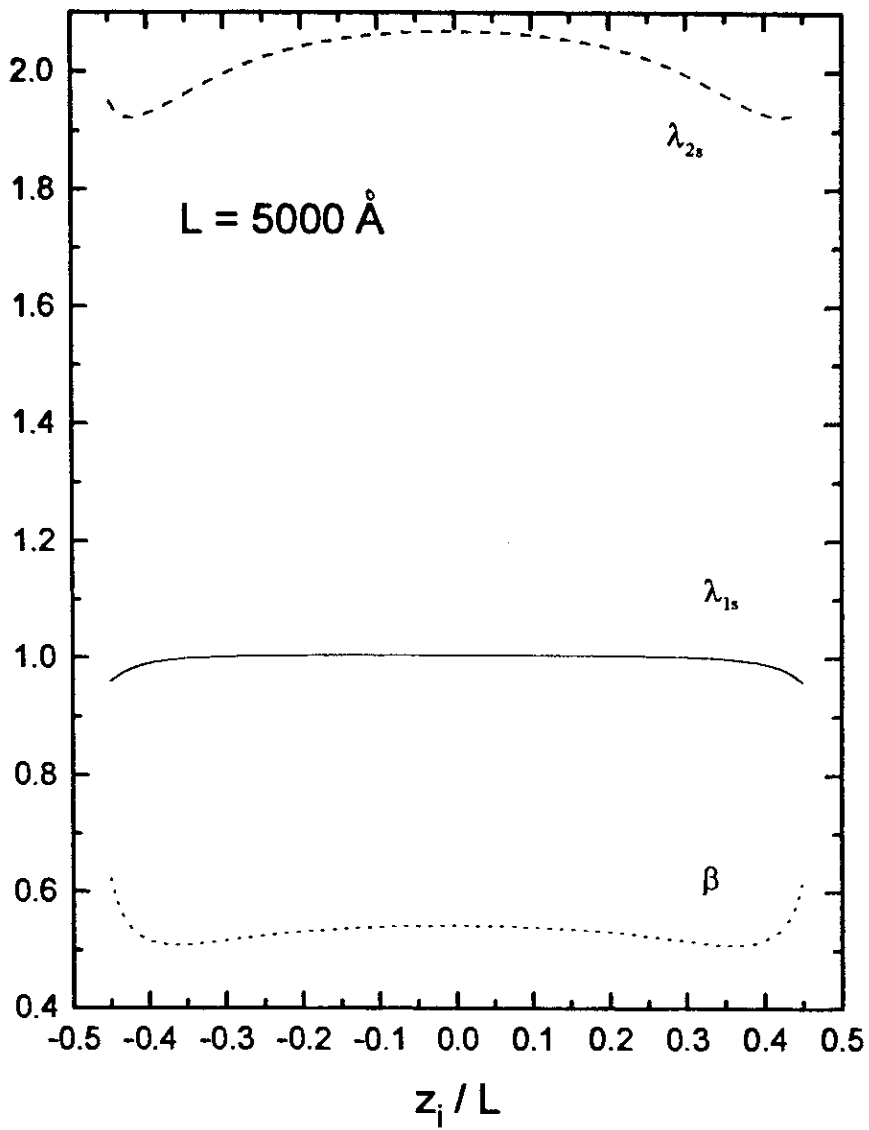


Figura 5.4

Parâmetros variacionais usados para obter a energia de ligação apresentada no gráfico anterior para largura de poço $L=5000\text{\AA}$.

CAPÍTULO 6

Conclusões

Neste capítulo nós faremos uma síntese dos trabalhos que foram descritos nos capítulos anteriores e suas respectivas conclusões. Também vamos apresentar algumas propostas para futuros trabalhos na linha de pesquisa que adotamos.

Em todos os trabalhos aqui expostos relacionados com impurezas rasas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As, nós adotamos o método da função de onda envelope na aproximação de bandas parabólicas, ou como é conhecido na aproximação da massa efetiva e utilizamos um método variacional para calcular as energias de ligação dos estados de impurezas. Como foi mencionado no capítulo 1, outros métodos também são empregados para o cálculo das propriedades eletrônicas e de impurezas para sistemas de baixa dimensionalidade, tais como: Método de Combinação Linear de Orbitais Atômicos⁽³⁶⁾ (LCAO), Tight Binding⁽³⁷⁻³⁸⁾ e Pseudo Potenciais⁽³⁹⁻⁴⁰⁾, entretanto todos estes métodos levam em conta as características microscópicas do sistema, enquanto que na aproximação da massa efetiva não se tem este problema, os efeitos provenientes das interações cristalinas são compensados por uma renormalização da massa do elétron (num Hamiltoniano monoelétrônico) passando este a se comportar como se tivesse uma outra massa, que usualmente chamamos de massa efetiva e que normalmente é menor do que a

massa do elétron livre. O uso deste modelo⁽³⁴⁾ é vantajoso pois muitas vezes é possível se encontrar expressões analíticas ou fórmulas de recorrência para o cálculo das energias. Por outro lado, este modelo limita-se a cálculos em pontos de alta simetria no espaço recíproco.

No capítulo 2, nós recalculamos as energias de ligação de impurezas doadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As submetidos à campo elétrico externo. Neste trabalho, propusemos uma função de onda envelope que é dada pela solução exata do problema do poço quântico com campo elétrico externo (sem o potencial da impureza) multiplicado pela função de onda hidrogenóide tipo-s, com simetria elíptica, possuindo dois parâmetros variacionais e contendo explicitamente a posição da impureza no poço quântico. No limite de campo elétrico nulo e poço infinito, esta função de onda tentativa recai no resultado utilizado por Bastard⁽³³⁾ e para largura de poço muito grande recupera o resultado exato do *bulk* do GaAs. Quando comparamos nossos resultados com aqueles obtidos em trabalhos anteriores^(65,68), para a mesma largura do poço e posição da impureza, encontramos valores maiores para as nossas energias de ligação; mostrando assim que a nossa função de onda envelope descreve melhor o comportamento da carga eletrônica dentro do poço. Isto já era esperado pois para poços estreitos ou campos elétricos intensos a distribuição da carga elétrica deve ser altamente anisotrópica.

Nós estudamos os efeitos do campo elétrico sobre o espectro de absorção ótica de doadores e aceitadores em poços quânticos finitos e infinitos de GaAs-(Ga,Al)As (capítulo 3) e sobre o espectro de fotoluminescência relacionado à recombinação de aceitadores em poços quânticos dopados (capítulo 4). O campo elétrico é aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura. Nestes cálculos, usamos uma função de onda tentativa com um único parâmetro variacional, com simetria esférica e cuja extensão do seu alcance é simulada por este parâmetro. Sabemos que esta não é a melhor escolha para a função de onda envelope, como foi visto no capítulo 2, entretanto do ponto de vista numérico a obtenção simultânea de dois parâmetros via método de minimização aumenta

enormemente o tempo computacional, especialmente quando o cálculo envolve integrais numéricas. Por outro lado se analisamos as energias de ligação apresentadas na figura 2.1, que compara os resultados obtidos com as funções de onda envelope com um e dois parâmetros variacionais, observamos que apesar de melhorarmos os resultados estas mudanças não são tão significativas e este efeito sobre os espectros de absorção ótica e fotoluminescência de impurezas seria um pequeno deslocamento das curvas para energias mais baixas.

No capítulo 3 nós fizemos uma análise sistemática das formas de linhas da absorção ótica relacionada com impurezas doadoras e aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de um campo elétrico externo e constante, aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura. Nós investigamos a dependência do espectro com a largura do poço e intensidade do campo elétrico. O espectro de absorção apresenta um pico associado a transições para o topo da banda de impurezas e duas singularidades do tipo van Hove, que correspondem a transições para impurezas situadas nas bordas do poço quântico. Estas duas singularidades transformam-se em uma única no limite de campo elétrico nulo. Na medida que a intensidade do campo elétrico aumenta, o espectro de absorção é deslocado para energias mais baixas, suas intensidades reduzidas e a importância relativa das singularidades de van Hove alteradas. Tal efeito torna-se mais pronunciado em poço largos.

Do nosso conhecimento, não existem dados experimentais que descrevam o espectro de absorção ótica de impurezas em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As sob a influência de campo elétrico. Entretanto, estas medidas podem ser efetuadas, e nós acreditamos que os resultados presentes neste trabalho serão de grande importância para a interpretação dos dados experimentais e compreensão deste fenômeno.

No capítulo 4 nós apresentamos um estudo da fotoluminescência relacionada a recombinação de impurezas aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As submetido a campos elétricos externos e constantes. A forma das curvas de

fotoluminescência dos aceitadores dependem diretamente da intensidade do campo elétrico aplicado, da temperatura, da energia de Fermi do gás de elétrons na banda de condução, e da distribuição de aceitadores ao longo do poço quântico. Nós mostramos que as formas das curvas do espectro de fotoluminescência, para uma dopagem uniforme de impurezas são essencialmente caracterizados pela presença de três estruturas: um pico associado a transições que envolvem aceitadores no topo da banda de impurezas e duas singularidades do tipo de van-Hove que estão relacionados as transições para aceitadores situados nas bordas do poço quântico.

No capítulo 5 nós analisamos o cálculo do estado fundamental associado as impurezas rasas num poço quântico (infinito) de GaAs-(Ga,Al)As. Usamos o método variacional na aproximação da massa efetiva e consideramos que a nossa função de onda tentativa é dada como uma combinação linear das funções de onda dos estados hidrogenóides 1s e 2s multiplicadas pela função de onda do poço quântico sem o potencial da impureza. O que efetivamente fizemos foi diagonalizar uma matriz 2×2 , onde foi levado em conta a ortogonalização entre os estados envolvidos e obtivemos simultaneamente os três parâmetros variacionais que minimizavam a energia do estado mais baixo. Apesar deste ser um processo mais refinado, o que nós mostramos e que a energia do estado fundamental associada as impurezas rasas em poços quânticos essencialmente não se altera quando comparada com resultados anteriores que não incluíam mistura entre os diferentes estados de energia.

Como propostas para futuros trabalhos, ainda utilizando o formalismo da aproximação da massa efetiva associada ao método variacional, um cálculo que me parece ser a extensão direta destes apresentados aqui, é observar os efeitos de um campo elétrico constante e aplicado longitudinalmente em fios e pontos de poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As com seção reta quadrada ou retangular. Estas especificações quanto a forma geométrica dos poços tornam os cálculos mais imediatos.

Nos meados de 1993 foi publicado o artigo de Wang e Chuu⁽¹³⁾, neste é calculado o espectro energético para um poço quântico na presença de campo elétrico e magnético cruzados. O campo elétrico é aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura e o campo magnético na direção perpendicular a este. A este sistema, poderíamos adicionar impurezas rasas e então estudar como que suas propriedades se alterariam devido a presença destes campos cruzados. O primeiro passo seria a reconstrução do espectro energético, calculando-se a função de onda envelope através de soluções exatas do problema, que seriam descritas em termos das funções hipergeométricas-confluentes. Depois com o auxílio do método variacional calcularíamos as energias de ligação associadas as impurezas rasas, e sequencialmente a obteríamos as propriedades óticas.

Na verdade, o estudo de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, é uma linha de pesquisa que tem sido bastante explorada, inúmeros são os artigos publicados, tanto sob o ponto de vista teórico como experimental. No entanto, uma das grandes dificuldades que ainda persistem é que experimentalmente é difícil estimar a intensidade do campo elétrico dentro do poço quântico. Então para fazer uma comparação de um modelo teórico no qual o campo elétrico está presente com dados experimentais se tornam difíceis.

APÊNDICE A

Unidades Atômicas Efetivas

Um procedimento muito útil é o de utilizar unidades atômicas reduzidas ou efetivas em problemas de impurezas. A vantagem é de deixar as Hamiltonianas livres de constantes embaraçosas.

O Rydberg efetivo é calculado de modo semelhante ao Rydberg, trocando a massa do elétron pela massa efetiva da banda de valência ou de condução e introduzindo a constante dielétrica do material,

$$R_0^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} \quad (\text{A.1})$$

Da mesma forma, o raio de Bohr efetivo escreve-se como:

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} \quad (\text{A.2})$$

Para impurezas doadoras no GaAs, $R_0^* = 5.72\text{meV}$ e $a_0^* = 100\text{Å}$, e para impurezas aceitadoras no GaAs, $R_0^* = 26\text{meV}$ e $a_0^* = 22\text{Å}$.

APÊNDICE B

Solução Exata para o Problema do Poço Quântico Submetido à Campo Elétrico

Neste apêndice mostraremos o cálculo para a solução exata de H_0 , eq.(2.2). Determinaremos exatamente (na aproximação da massa efetiva) as funções de onda envelope para um modelo de poço quântico sob a ação de um campo elétrico constante e aplicado paralelo a direção de crescimento da heteroestrutura, considere inicialmente o Hamiltoniano:

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_b \theta(z^2 - L^2/4) + |e|Fz, \quad (\text{B.1})$$

onde z é a direção de crescimento da heteroestrutura e a origem é tomada no centro do poço quântico. A borda da banda de condução do GaAs é definida como origem da energia. V_b é a altura da barreira, $\theta(z^2 - L^2/4)$ é a função degrau de Heaviside e L é a largura do poço quântico. F é a intensidade do campo elétrico aplicado. m^* é a massa efetiva da banda de condução ou de valência. Estamos considerando o campo elétrico somente dentro do poço quântico.

O elétron é confinado na direção z , enquanto que nas direções x e y ele é livre. A solução para a eq.(B.1) pode ser escrita como

$$\Phi_0(x, y, z) = \Phi_0(z)e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (\text{B.2})$$

No intervalo de $-L/2 \leq z \leq L/2$, a eq.(B.1) se escreve como

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \Phi_0(z)}{dz^2} + |e|Fz \Phi_0(z) = E_0 \Phi_0(z). \quad (\text{B.3})$$

Faremos a mudança de variável

$$\zeta = \frac{a_c}{L} z - \frac{E_0}{\hbar \omega_c}, \quad (\text{B.4})$$

onde

$$\omega_c = \frac{(eF)^{2/3}}{(2m^* \hbar)^{1/3}} \quad (\text{B.5})$$

e

$$a_c = \left(\frac{2m^* \omega_c}{\hbar} \right)^{1/2} L. \quad (\text{B.6})$$

Substituindo a eq.(B.2) em (B.1), temos

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{a_c}{L} \right)^2 \frac{d^2 \Phi_0(\zeta)}{d\zeta^2} + |e|F \left(\zeta + \frac{E_0}{\hbar \omega_c} \right) \left(\frac{L}{a_c} \right) \Phi_0(\zeta) = E_0 \Phi_0(\zeta). \quad (\text{B.7})$$

Reagrupando a expressão acima, encontramos

$$\frac{d^2 \Phi_0(\zeta)}{d\zeta^2} - \zeta \Phi_0(\zeta) = 0. \quad (\text{B.8})$$

A solução exata da eq.(B.8) se escreve como uma combinação linear das funções de Airy⁽⁶⁴⁾

$$\Phi_0(\zeta) = \alpha \text{Ai}(\zeta) + \beta \text{Bi}(\zeta) . \quad (\text{B.9})$$

Estas funções são definidas⁽⁸⁶⁾ como

$$\text{Ai}(\zeta) = (1/\pi) \int_0^{\infty} \cos[(u^3/3) + \zeta u] du \quad (\text{B.10})$$

e

$$\text{Bi}(\zeta) = (1/\pi) \int_0^{\infty} \{ \sin[(u^3/3) + \zeta u] + \exp[(-u^3/3) + \zeta u] \} du . \quad (\text{B.11})$$

Os coeficientes α e β da eq.(B.9) são definidos através das condições de contorno nas interfaces do poço quântico.

APÊNDICE C

Cálculo da Energia de Ligação de Impurezas Rasas em Poços Quânticos com Campo Elétrico Aplicado

Neste apêndice calcularemos as energias de ligação de impurezas rasas doadoras ou aceitadoras em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As, submetidos a campo elétrico externo. Trabalharemos dentro da aproximação da massa efetiva num modelo de banda parabólica e utilizaremos o método variacional.

A Energia de ligação é definida como

$$E(L, z_i) = E_0 - E(\lambda, \eta), \quad (\text{C.1})$$

onde

$$E(\lambda, \eta) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (\text{C.2})$$

A energia de ligação corresponde à diferença entre a energia do estado fundamental do poço quântico com o campo elétrico aplicado (sem o potencial da impureza), E_0 , e a energia dada por H , eq.(2.1), calculada através do método variacional

O valor médio do Hamiltoniano H, eq.(2.1), escreve-se como

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \Psi | -\nabla^2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | [V_b \theta(z^2 - L^2/4) + e|Fz]| \Psi \rangle + \langle \Psi | V_h | \Psi \rangle . \quad (C.3)$$

Assim como foi apresentado no capítulo 2, a função de onda tentativa que descreverá o movimento do elétron da impureza no poço quântico sob a ação de um campo elétrico externo será dada pelo produto da autofunção de H_0 com a função de onda hidrogenóide tipo s, pois estamos supondo que a impureza está no estado fundamental,

$$\Psi(\mathbf{r}) = N_{\lambda,\eta} \Phi_0(z) \phi_{\lambda,\eta}(\mathbf{r}) , \quad (C.4)$$

onde $N_{\lambda,\eta}$ é a constante de normalização que depende da largura do poço quântico L, da posição da impureza e dos parâmetros variacionais λ e η .

A função de onda hidrogenóide tipo s contém dois parâmetros variacionais, λ e η , e é dada por

$$\phi_{\lambda,\eta}(\mathbf{r}) = \exp\{-(1/\lambda)[\rho^2 + \eta^2(z - z_i)^2]^{1/2}\} . \quad (C.5)$$

Quando o primeiro termo da eq.(C.3) é integrado por partes, obtem-se:

$$\langle \Psi | -\nabla^2 | \Psi \rangle = \langle \bar{\nabla} \Psi | \bar{\nabla} \Psi \rangle . \quad (C.6)$$

Mas

$$\bar{\nabla} \Psi = \bar{\nabla}(\Phi_0 \phi_{\lambda,\eta}) = \Phi_0 \bar{\nabla} \phi_{\lambda,\eta} + \phi_{\lambda,\eta} \bar{\nabla} \Phi_0 . \quad (C.7)$$

Substituindo a eq.(C.7) em eq.(C.6), encontramos

Para obter esta equação, foi usado o truque de somar e diminuir o seguinte termo $\frac{\eta^2(z-z_i)^2}{[\rho^2 + \eta^2(z-z_i)^2]}$. Agora podemos reescrever o valor médio de H em termos da energia

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\eta^2(\eta^2+1)}{\lambda^2} \langle \Psi \left[\frac{(z-z_i)^2}{[\rho^2 + \eta^2(z-z_i)^2]} \right] \Psi \rangle \right\} + \langle \Psi | V_b | \Psi \rangle, \quad (C.14)$$

onde

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \phi_{\lambda,\eta} | (\Phi_0 \nabla^2 \Phi_0) \phi_{\lambda,\eta} \rangle + \langle \Psi | [V_b \theta(z^2 - L^2/4) + |e|Fz] | \Psi \rangle. \quad (C.15)$$

Aplicando a definição da energia de ligação, eq.(C.1), finalmente obtemos

$$E(L, z_i) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \frac{1}{\lambda^2} + \frac{\eta^2(\eta^2+1)}{\lambda^2} \langle \Psi \left[\frac{(z-z_i)^2}{[\rho^2 + \eta^2(z-z_i)^2]} \right] \Psi \rangle \right\} - \langle \Psi | V_b | \Psi \rangle. \quad (C.16)$$

Devemos lembrar que este resultado só é aplicável se considerarmos que a função de onda hidrogenóide for do tipo s, dada pela eq.(C.5), ou seja, a impureza deve estar no estado fundamental.

REFERÊNCIAS

- (1) G. W. Wicks, *Crit. Rev. Sol. St. and Mat. Scien.* 18, (3) 239 (1993).
- (2) I. A. Kuz'min, A. G. Mashevshi, D. R. Stroganov, O. M. Fedorova e B. S. Yavich, *Sov. Phys. Semic.* 23, 883 (1989)
- (3) L. Esaki e R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* 14, 61 (1970).
- (4) L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* 24, 593 (1974).
- (5) M. J. Kelly e R. J. Nicholas, *Rep. Prog. Phys.* 48, 1699 (1985).
- (6) L. L. Chang e L. Esaki, *Physics Today*, October, p. 36 (1992).
- (7) H. Smith e H. Craighead, *Physics Today*, February, p. 24 (1990).
- (8) G. W. Bryant, *Phys. Rev. B* 29, 6632 (1984).
- (9) M. Reed, *Scientific American*, January, p. 98 (1993).
- (10) D. Heitmann e J. P. Kotthaus, *Physics Today*, June, p. 56 (1993).
- (11) J. P. van der Ziel, R. Dingle, R. C. Miller, W. Wiegmann e V. A. Nordland, *Appl. Phys. Lett.* 26, 463 (1975).
- (12) R. Dingle, H. L. Stormer, A. C. Gossard e W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 33, 665 (1978).
- (13) J. N. Schulman e T. C. McGill, *Appl. Phys. Lett.* 34, 663 (1979).
- (14) A. C. Gossard, *Inst. Phys. Conf. Serv.* 69, 1 (1983).
- (15) N. T. Linh, *Inst. Phys. Conf. Serv.* 69, 15 (1983).
- (16) S. Tarucha e H. Okamoto, *Appl. Phys. Lett.* 48, 1 (1986).
- (17) K. von Klitzing, G. Dorda e M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).
- (18) D. C. Tsui e A. G. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* 38, 550 (1981).
- (19) D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. G. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 48, 1559 (1982).
- (20) R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1395 (1983).
- (21) L. Esaki e L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* 33, 495 (1974).
- (22) R. Dingle, W. Wiegmann e C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* 33, 827 (1974).

- (23) R. Dingle, A. C. Gossard e W. Wiegmann, *Bull. Amer. Phys. Soc.*, Paper AF-10, March (1975).
- (24) R. Dingle, H. L. Stormer, W. Wiegmann e C. H. Henry, *Appl. Phys. Lett.* 33, 665 (1978).
- (25) M. J. Kelly e R. J. Nicholas, *Rep. Prog. Phys.* 48, 1699 (1985).
- (26) V. Narayanamurti, *Science* 235, 1023 (1987).
- (27) F. Copasso e S. Datta, *Physics Today*, February, p. 74 (1990).
- (28) M. Kastner, *Physics Today*, January, p. 24 (1993).
- (29) E. E. Mendez e G. Bastard, *Physics Today*, June, p. 34 (1993).
- (30) S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 58, R1 (1985).
- (31) R. C. Miller, D.A. Kleinman e A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* 29, 7085 (1984).
- (32) W. Wang, E. E. Mendez e F. Stern, *Appl. Phys. Lett.* 45, 639 (1984).
- (33) G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 4714 (1981).
- (34) G. Bastard, "Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures", France.
- (35) N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, "Solid State Physics", Philadelphia: Saunders College Publishing, USA.
- (36) A. S. Davidov, "Teoria del Sólido", Editorial Mir Moscú (1981).
- (37) J. N. Schulman e Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* 24, 4445 (1981).
- (38) J. N. Schulman e Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* 31, 20565 (1985).
- (39) M. Jaros e K. B. Wong, *J. Phys. C* 17, L 765 (1984).
- (40) M. Jaros e K. B. Wong, *Phys. Rev. B* 31, 1205 (1985).
- (41) C. Mailhot, Y. C. Chang e T. C. McGill, *Phys. Rev. B* 26, 4449 (1982).
- (42) R. L. Greene e K. K. Bajaj, *Sol. Stat. Comm.* 45, 825 (1985).
- (43) L. Wendler e B. Hartwig, *J. Phys. Cond. Mat.* 2, 8847 (1990).
- (44) Z. Y. Deng e S. W. Gu, *Phys. Rev. B* 48, 8083 (1993).
- (45) K. Tanaka, M. Nagaoka e T. Yamabe, *Phys. Rev. B* 28, 7068 (1983).
- (46) S. Chaudhuri, *Phys. Rev. B* 28, 4480 (1983).
- (47) W. T. Masselink, Yia-Chung Chang e H. Morkoç, *Phys. Rev. B* 28, 7373 (1983).
- (48) S. Chaudhuri e K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* 31, 913 (1985)
- (49) R. Greene e K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* 31, 913 (1985).

- (50) L. E. Oliveira e L. M. Falicov, *Phys. Rev. B* **34**, 8676 (1986).
- (51) L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **38**, 10641 (1988).
- (52) L. E. Oliveira, *Superlatt. and Microstr.* **5**, 23 (1989).
- (53) G. Bastard, *J. Lumin.* **30**, 488 (1986).
- (54) B. V. Shanabrook, *Physica* **146B**, 121 (1987).
- (55) C. Delalande, *Physica Scripta* **19**, 129 (1987).
- (56) L. E. Oliveira e R. P. Alvarez, *Phys. Rev. B* **40**, 10460 (1989).
- (57) L. E. Oliveira e R. P. Alvarez, *Sol. Stat. Comm.* **70**, 523 (1989).
- (58) L. E. Oliveira e J. L. Gondar, *Phys. Rev. B* **41**, 3719 (1990).
- (59) L. E. Oliveira e J. L. Gondar, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 2751 (1989).
- (60) L. E. Oliveira e G. D. Mahan, *Phys. Rev. B* **47**, 2406 (1993).
- (61) X. Liu, A. Petrou, B. D. McCombe, J. Ralston e G. Wicks, *Phys. Rev. B* **38**, 8522 (1988).
- (62) G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang e L. Esaki, *Phys. Rev. B* **28**, 3241 (1983).
- (63) C. T. Giner e J. L. Gondar, *Physica* **138B**, 287 (1986).
- (64) E. J. Austin e M. Jaros, *Phys. Rev. B* **31**, 5569 (1985).
- (65) J. A. Brum, C. Priester e G. Allan, *Phys. Rev. B* **32**, 2378 (1985).
- (66) W. T. Masselink, Y. C. Chang e H. Morkoç, *Phys. Rev. B* **32**, 5190 (1985).
- (67) G. Weber, *Phys. Rev. B* **41**, 10043 (1990).
- (68) J. L. Gondar, J. d'Albuquerque e Castro e L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **42**, 7069 (1990).
- (69) M. Cai e W. Liu, *Physica B* **172**, 429 (1991).
- (70) C. S. Wang e D. S. Chuu, *Physica B* **191**, 227 (1993).
- (71) J. Chen e K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **48**, 8061 (1993).
- (72) G. Weber, P. A. Schulz e L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **38**, 2179 (1988).
- (73) A. Latgé, N. P. Montenegro e L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **45**, 9420 (1992).
- (74) A. Latgé, M. de Dios-Leyva e L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **49**, 10450 (1994).
- (75) A. Latgé, L. E. Oliveira e N. P. Montenegro, *Phys. Rev. B* **47**, 13864 (1993).
- (76) S. V. Branis, G. Liu e K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **47**, 1316 (1993).
- (77) N. P. Montenegro e S. T. P. Merchancano, *Phys. Rev. B* **46**, 9780 (1992).
- (78) R. C. Miller, A. C. Gossard, W. T. Tsang e O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **25**, 3871 (1982).

- (79) R. C. Miller e A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* 43, 954 (1983).
- (80) M. H. Meynandier, J. A. Brum, C. Delalande, M. Voos e J. L. Liévin, *J. Appl. Phys.* 58, 4307 (1985).
- (81) L. I. Schiff, "Quantum Mechanics", McGraw-Hill, New York (1968)
- (82) B. V. Shanabrook, J. Comas, T. A. Perry e R. Merlin, *Phys. Rev. B* 29, 7096 (1984).
- (83) B. Yoo, B. D. McCombe e W. Schaff, *Phys. Rev. B* 44, 13152 (1991).
- (84) A. S. Davydov, "Quantum Mechanics", Pergamon Press, Oxford (1965)
- (85) B. A. Vojak, W. D. Laidig, N. Holonyak Jr. e M. D. Camras, *J. Appl. Phys. Lett.* 52, 621 (1981).
- (86) M. Abramowitz, "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables", Washington National Bureau of Standards (1965).
- (87) Strzalkowski, S. Joshi e C. R. Crowell, *Appl. Phys. Lett.* 28, 350 (1976).
- (88) R. L. Greene e K. K. Bajaj, *Sol. Stat. Comm.* 53, 1103 (1985).
- (89) C. Delalande, *Physica B+C* 146B, 112 (1987).
- (90) Y. C. Chang, *Physica B+C* 146B, 137 (1987).
- (91) A. A. Reeder, J. M. Mercy e B. D. McCombe, *IEEE J. Quant. Electr.* 24, 1690 (1988).
- (92) B. S. Yoo, L. He, B. D. McCombe, W. Schaff - *Superlatt. Microst.* 8, 297 (1990).
- (93) F. Bassani e G. P. Paravicini - "Electronic States and Optical Transitions in Solids", Pergamon Oxford, R. A. Ballinger (1975).
- (94) A. K. Ramdas e S. Rodeiguez, *Rep. Prog. Phys.* 44, 1297 (1981).
- (95) E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang e L. Esaki, *Phys. Rev. B* 26, 7101 (1982).
- (96) L. E. Oliveira e M. de Dios-Leyva, *Phys. Rev. B* 48, 15092 (1993).
- (97) A. M. White, P. J. Dean, L. L. Taylor, R. C. Clarke, D. J. Ashen e J. B. Mullin, *J. Phys. C* 5, 1727 (1972).
- (98) S. Frazzoli e A. Pasquarello, *Phys. Rev. B* 42, 5349 (1990).
- (99) P. O. Holtz, M. Sundaram, K. Doughty, J. L. Merz e A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* 40, 12338 (1989).
- (100) R. Faulkner, *Phys. Rev.* 184, 713 (1969).

(101) B. C. F. Colchesqui, P. D. Emmel, E. A. de Andrada e I. C. da Cunha Lima, *Phys. Rev. B* 40, 12513 (1989).

(102) P. D. Emmel e I. C. da Cunha Lima, *Sol. Stat. Comm.* 79, 431 (1991).