

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

**Estudo da Absorção Ótica Intra-sítio  
em Doadores Situados em  
Poços Quânticos Compensados**

Tese apresentada ao Instituto de Física da  
Universidade de São Paulo para obtenção do título de  
Doutor em Ciências

**Paulo Daniel Emmel**

**Orientador: Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima**

São Paulo  
1991



A vocês

Oscar, Lucinha e Marcos,

para sempre inesquecíveis.

# Agradecimentos

A realização deste trabalho só foi possível graças ao apoio de muitas pessoas. Quero manifestar meu reconhecimento a todos que direta ou indiretamente me ajudaram.

Começando, dirijo-me àqueles que não mediram esforços para que este trabalho pudesse iniciar-se, meus amigos Hamilton e Luiz Eugênio.

Gostaria também de agradecer o voto de confiança dado pelos professores Luci, Vivili, José Roberto e Ivan, através do qual ingressei no programa de doutoramento do IFUSP.

O trabalho de pesquisa traz consigo uma série de necessidades paralelas, tais como acomodação, biblioteca, computador, secretarias, desenhistas etc. O pleno atendimento a elas deu-se graças a receptividade dos professores e funcionários da USP, bem como a uma estrutura muito bem montada. Igualmente agradeço ao pessoal do INPE, que me proporcionou todas as condições de trabalho, como se eu fosse um dos seus. À UFSCar, em particular ao Depto. de Física, sou imensamente grato por ter-me dado condições de dedicar integralmente à tese.

Fundamental foi o apoio financeiro dado pela CAPES, através do programa de PICD.

Muitos contribuíram para que eu pudesse concluir este trabalho. Durante os quatro anos em que estive em São Paulo, fiz muitos amigos, principalmente entre os companheiros de pós-graduação. Nunca poderei me esquecer das rodadas de chimarrão e das confraternizações por ocasião das defesas de teses. A todos os colegas da sala 109 e adjacências, aquele abraço. Confesso que sentirei muita falta de vocês.

Agradeço também ao Coralusp, pela possibilidade de utilizar meus intervalos em uma atividade de lazer, ajudando-me a renovar as energias para o trabalho.

Quero agradecer de modo especial, ao “seu” Régis, meu sogro. Durante minha estada em São Paulo ele foi um amigo com quem pude sempre contar a qualquer hora.

Agradeço, com muito carinho, à Malu, à Vanessa, ao Maurício e ao Marcelo, por terem me dado suporte familiar de que tanto necessitei nestes anos de tese. Sinto não ter podido compartilhar mais ativamente de suas companhias e ter-lhes dado tão pouco de mim durante este período.

Gostaria de agradecer aos amigos Erasmo, Bianor e Maurício, pela solidariedade, pelo companherismo e pelo muito que aprendi com eles nas discussões científicas e bate-papos informais.

Quero agradecer também a ajuda inestimável dada pelos profs. José Roberto, Kazunori e Lauro, que me deram contribuições valiosas.

Por fim gostaria de agradecer ao Ivan, meu orientador.

“Mais que orientador você foi um amigo, com quem trabalhar foi um prazer. Suas discussões sempre objetivas, aliadas a um bom humor nato, tornaram sempre agradáveis as reuniões de trabalho. Sabendo muito bem dirigir as tarefas, proporcionou-me a liberdade necessária para dar andamento à tese, sem porém dela se desligar. Sendo um profundo conhecedor da área, suas idéias semearam muitos trabalhos. Através do nosso convívio pude experimentar uma orientação segura e amistosa, o que tornou possível apreender muito do seu ser profissional, realizando, com relativa tranquilidade, todos os passos desta investigação.”

# Índice

Dedicatória	i
Agradecimentos	ii
Resumo	x
Abstract	xi
1 Introdução.	1
2 Estados de impurezas doadoras rasas em poços quânticos	10
3 Absorção de fótons por doadores em poços quânticos	39
4 O poço quântico dopado e compensado. Simulação Monte Carlo	51
5 Comentários finais e conclusões	72
A Sistema efetivo de unidades	77
B Expansão multipolar do potencial de uma carga puntiforme	79
C O átomo de hidrogênio confinado em duas dimensões	83
D O método variacional	88
E Polarização e superposição das funções de onda de átomos hidrogenóides	94

F	Integrais usadas no cálculo variacional com campo magnético nulo	105
G	Artigos publicados	109
	Bibliografia	110

# Índice de Figuras

1.1	<i>Esquema de um crescedor de cristais do tipo MBE.</i>	2
1.2	<i>Esquema de bandas de energia em uma junção MOS, variando-se a voltagem de "gate".</i>	4
1.3	<i>Super-redes composicionais dos tipos I e II</i>	5
1.4	<i>(a) Super-rede <math>Ga_{1-x}Al_xAs</math>-GaAs dopada modularmente com doadores e (b) super-rede dopada "nipi".</i>	6
2.1	<i>Estrutura eletrônica de bandas para o GaAs</i>	12
2.2	<i>Representação esquemática da função de onda de um elétron ligado a uma impureza doadora rasa.</i>	13
2.3	<i>Energia da primeira sub-banda para poços quânticos finito e infinito, em função da largura do poço.</i>	16
2.4	<i>Diferença das energias da primeira sub-banda dos poços infinito e finito (<math>V_0 = 50 Ry^*</math>).</i>	17
2.5	<i>Energias do nível 2s segundo dois tipos de funções variacionais</i>	23
2.6	<i>Energias do nível 3s segundo dois tipos de funções variacionais.</i>	24
2.7	<i>Energias do nível 3p segundo dois tipos de funções variacionais.</i>	25
2.8	<i>Energias dos estados ligados para uma impureza em um poço quântico de largura <math>1a^*</math></i>	27
2.9	<i>Energias dos estados ligados para uma impureza em um poço quântico de largura <math>4a^*</math></i>	28
2.10	<i>Energias de ligação para estados com <math>n = 1</math> de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço.</i>	29
2.11	<i>Energias de ligação para estados com <math>n = 2</math> de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço.</i>	30
2.12	<i>Energias de ligação para estados com <math>n = 3</math> de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço.</i>	31
2.13	<i>Energias de um poço quântico de largura <math>L = 1a^*</math> e <math>\gamma = 3,0</math>.</i>	34

2.14	<i>Superfícies nodais de uma impureza central.</i> . . . . .	36
2.15	<i>Densidades de estados para um poço quântico dopado levemente com doadores, com e sem campo magnético aplicado.</i> . . . . .	38
3.1	<i>Absorção de um fóton por um doador em um poço quântico</i> . . . . .	41
3.2	<i>Coefficientes de absorção para as transições <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}, 3p_{\pm}</math>, na ausência de campo magnético aplicado e com dopagem uniforme de doadores.</i> . . . . .	48
3.3	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}</math> com campo magnético nulo e distribuições gaussianas e do tipo delta.</i> . . . . .	49
3.4	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}</math> com campo magnético nulo e duas distribuições gaussianas de larguras diferentes.</i> . . . . .	50
4.1	<i>Esquema de níveis ocupados e vazios para doadores em um poço quântico dopado e compensado.</i> . . . . .	57
4.2	<i>Teste da mudança de nível</i> . . . . .	57
4.3	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}</math> com <math>\gamma = 0</math> e vários valores de compensação.</i> . . . . .	61
4.4	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 3p_{\pm}</math> com <math>\gamma = 0</math> e vários valores de compensação.</i> . . . . .	62
4.5	<i>Coefficiente de absorção para as transições <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}</math> com dopagem tipo delta.</i> . . . . .	66
4.6	<i>Coefficiente de absorção para as transições <math>1s \rightarrow 3p_{\pm}</math> com dopagem tipo delta.</i> . . . . .	67
4.7	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 2p_{-}</math> com dopagem tipo delta para várias compensações.</i> . . . . .	68
4.8	<i>Coefficiente de absorção para a transição <math>1s \rightarrow 2p_{-}</math> com dopagem tipo delta para vários campos magnéticos aplicados.</i> . . . . .	70
4.9	<i>Variação do coeficiente de absorção com a densidade de doadores.</i> . . . . .	71
5.1	<i>Energias das transições <math>1s \rightarrow 2p_{\pm}</math> para dopagens centrais do tipo delta, com poços quânticos de larguras diferentes, em função do campo magnético aplicado.</i> . . . . .	75
5.2	<i>Energias das transições <math>1s \rightarrow 3p_{\pm}</math> para dopagens centrais do tipo delta, com poços quânticos de larguras diferentes, em função do campo magnético aplicado.</i> . . . . .	76

E.1	<i>Esquema de deslocamento uniforme da nuvem eletrônica causado pela proximidade de um doador ionizado. . . . .</i>	96
E.2	<i>Densidades de probabilidades de encontrar elétrons ligados a duas impurezas, ao longo da reta definida pelas impurezas. . .</i>	101
E.3	<i>Caminho de integração no plano de Argand-Gauss, para o cálculo de <math>S(\mathbf{R})</math> . . . . .</i>	103

# Índice de Tabelas

2.1	<i>Energias de ligação para os níveis 1s, 2s e 2p, de doadores rasos em GaAs. . . . .</i>	12
2.2	<i>Parte radial das funções de onda do átomo de hidrogênio confinado em duas dimensões e não confinado. . . . .</i>	20
2.3	<i>Coefficientes <math>a_j(L)</math> para os limites <math>L \rightarrow 0</math> e <math>L \rightarrow \infty</math>. . . . .</i>	21
2.4	<i>Raios das superfícies nodais do estado 3s, para uma impureza central em um poço quântico de <math>1a^*</math>, variando-se o campo magnético. . . . .</i>	35
C.1	<i>Estados, parâmetros e polinômios das funções de onda do átomo de hidrogênio em 2D. . . . .</i>	87
D.1	<i>Energias dos três primeiros estados pares de um poço quadrado unidimensional infinito, obtidas algebricamente e variacionalmente. . . . .</i>	93
D.2	<i>Posições dos dois nodos à direita da origem para a função de onda <math>\psi_5</math> de um poço quadrado infinito. . . . .</i>	93

# Resumo

**“Estudo da absorção ótica intra-sítio em doadores situados em poços quânticos compensados”**

Neste trabalho são calculados os sub-níveis  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_{\pm}$ ,  $3s$ ,  $3p_{\pm}$  e  $3d_{\pm 2}$  de elétrons ligados a impurezas doadoras em um poço quântico de GaAs/GaAlAs submetido a um campo magnético uniforme, via método variacional. São calculadas, então, as densidades de estados supondo-se uma distribuição uniforme de doadores, obtendo-se resultados que se assemelham aos do estado fundamental, com um pico principal e outro secundário. De posse do espectro desses sub-níveis rasos são calculados os coeficientes de absorção, na região do infra-vermelho distante, para as transições permitidas fazendo-se o uso da Regra de Ouro de Fermi. As densidades de doadores estão dentro dos limites do modelo de banda de impureza semi-clássica, portanto baixas densidades. Inicialmente é considerada uma compensação nula e uma distribuição uniforme de impurezas. Neste caso os cálculos são realizados analiticamente. Finalmente é considerada a compensação, sendo utilizada a simulação Monte Carlo. Neste segundo processo calcula-se o coeficiente de absorção, primeiramente considerando-se apenas o termo constante da expansão do potencial eletrostático das impurezas ionizadas. Em segunda etapa leva-se em conta os outros termos da expansão e faz-se um tratamento perturbativo. A forma da curva de absorção em infra-vermelho distante levando-se em conta este efeito da compensação é obtido pela primeira vez. São verificados alargamentos não homogêneos nas curvas de absorção e é estudado o efeito da variação da compensação e do campo magnético sobre o coeficiente de absorção. Este estudo constitui um elemento importante para o diagnóstico destas hetero-estruturas semicondutoras.

# Abstract

“Study of intra-site optical absorption in donors located at compensated quantum wells”

In this work we obtain the sub-levels  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_{\pm}$ ,  $3s$ ,  $3p_{\pm}$ , and  $3d_{\pm 2}$  of donor bound electrons in a GaAs/GaAlAs quantum well by a variational calculation. The densities of states are calculated assuming an uniform distribution of donors, obtaining results similar to that of the ground state, with two peaks, a fundamental and a secondary. We calculate, then, the absorption coefficient, in the far infrared region, by means the Fermi's Golden Rule. The densities of donors are within the limits of the Semiclassical Impurity Band, i. e., low densities. The calculations are made analitically. Finally we consider a non-zero compensation and utilize the Monte Carlo simulation. In this second process the absorption coefficient is calculated firstly considering only the constant term of the expansion of the electrostatic potential due to ionized impurities. Then a perturbative treatment is made with the other terms in the expansion. The shape of the absorption coefficient in the far infrared, with the effect of compensation, was obtained by the first time. Inhomogeneous broadenings appear in the absorptions curves and the effect of variation of compensation and magnetic field is studied. This study is an important element for hetero-structures diagnosis.

# Capítulo 1

## Introdução.

Os semicondutores constituem uma classe de materiais muito importante, tanto do ponto de vista tecnológico quanto do científico. A tecnologia dos semicondutores começou durante a Segunda Guerra Mundial quando foram feitos grandes esforços para desenvolver detectores de micro-ondas. Posteriormente, com a invenção do transistor, a eletrônica deu um grande passo. De fato, com um volume e peso muito menores que os das válvulas eletrônicas, os transistores necessitam de uma potência de alimentação baixa e tensões inferiores a uma dezena de volts. Com exceção dos modelos destinados à amplificação de potência, os transistores praticamente não dissipam calor e podem ser utilizados em circuitos bastante compactos. Sua vida útil ultrapassa 100.000 horas enquanto a eficácia de uma válvula diminui após 2.000 horas de uso. Em compensação, seu rendimento diminui com o aumento da temperatura.

Em meados dos anos 60 Cho [Ch 71] e Arthur [Ar 68] desenvolveram nos Laboratórios Bell a técnica de crescimento de cristais por Feixe Molecular Epitaxial (MBE - Molecular Beam Epitaxy). Um esquema desta técnica é mostrado na figura (1.1). MBE é uma técnica de ultra-alto vácuo, na qual feixes atômicos ou moleculares atingem um substrato, mantido a uma temperatura elevada sobre uma base aquecida. Os materiais a serem depositados no substrato são colocados em células, cujas temperaturas são bem controladas fazendo com que o fluxo de partículas possa ser ajustado. Em cada célula há um obturador que controla a saída do fluxo, podendo-se portanto fabricar camadas finas, da ordem de ângstrons, com uma composição estequiométrica desejada. Acoplam-se ao MBE equipamentos de diagnóstico tais

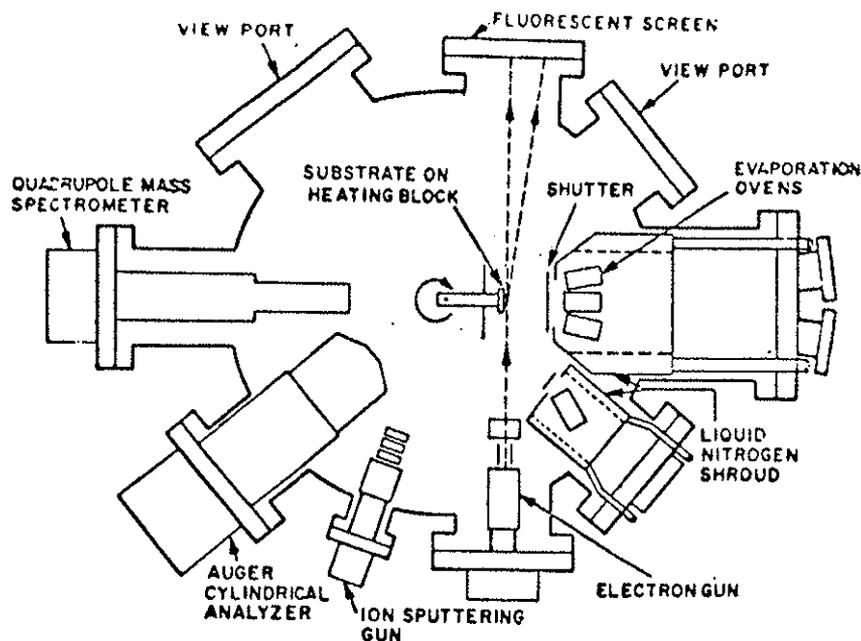


Figura 1.1: Esquema de um crescedor de cristais do tipo MBE.

como espectrômetro de massa, analisador Auger e Difratorômetro de Elétrons de alta Energia (HEED - High Energy Electron Diffraction). A técnica de MBE é portanto conveniente para se construir hetero-estruturas, que são cristais que apresentam descontinuidades abruptas em sua composição, por exemplo MOS (Metal — Óxido — Semicondutor), MIS (Metal — Isolante — Semicondutor), super-redes, poços quânticos, etc. Como exemplos de impacto tecnológico em materiais estruturados artificialmente temos [Mi 86] transistores do tipo “ Modulated-Doped High-Speed Field Effect Transistors”, “Ultra-High-Gain” e “High-Speed Bipolar Transistors”, lasers de poços quânticos, diodos de emissão de luz etc.

Em termos científicos, muitos fenômenos ligados a semicondutores foram objeto de estudo, tais como a diminuição da resistividade com o aumento da temperatura em contraste com o comportamento metálico, o papel das impurezas na condução elétrica dos semicondutores, as junções  $p-n$ , etc. Em

particular, as junções (metal-semicondutor, isolante-semicondutor, semicondutor com dopagens p e n adjacentes) apresentam uma região estreita ao redor da junção em que ocorrem camadas de depleção, acumulação ou inversão de portadores (elétrons ou buracos) [As 76, An 82]. Estes sistemas físicos são denominados sistemas quase bi-dimensionais. No caso de camadas de inversão e de acumulação teremos quantização da energia dos portadores de carga, relativamente ao movimento das partículas perpendicularmente à junção. Na figura (1.2) mostramos os esquemas de bandas de energia de um MOS formado com semicondutor do tipo  $n$ . A tensão de "gate" ( $V_g$ ) é aplicada entre o semicondutor e o metal. Variando-se  $V_g$  obtemos os diversos tipos de camadas. Tais sistemas são geralmente estudados por meio da Aproximação da Massa Efetiva (AME) desenvolvida por Luttinger e Kohn [Lu 55] e utilizando condições de contorno dadas por Ben-Daniel e Duke [Be 66].

Uma super-rede ocorre quando uma modulação periódica é imposta a um cristal diminuindo-lhe a dimensionalidade efetiva. Keldish [Ke 62] utilizou o ultrassom para produzir modulações periódicas em um cristal. Esaki e Tsu [Es 70] obtiveram em 1970 uma super-rede composicional. Döler, em 1972, construiu uma super-rede fazendo uma dopagem modulada em um semicondutor. Em termos gerais classificamos as super-redes composicionais em dois tipos, segundo a distribuição espacial de poços e barreiras para elétrons e buracos. No tipo I temos os poços e barreiras da banda de condução coincidindo com os da banda de valência. Um exemplo deste tipo de super-rede é o formado pela superposição dos materiais  $Ga_{1-x}Al_xAs$ - $GaAs$ . Já no tipo II temos uma coincidência dos poços (barreiras) da banda de condução com as barreiras (poços) da banda de valência. Um exemplo deste tipo de super-rede é o formado pelos materiais  $In_{1-x}Ga_xAs$ - $GaSb_{1-y}As_y$ . A figura (1.3) nos mostra um esquema dos dois tipos de super-redes composicionais. Às vezes as super-redes podem apresentar dopagens em determinadas regiões, chamando-se super-redes dopadas modularmente (Modulation Doped Superlattices). Em outras, temos um material semicondutor que apresenta dopagens do tipo n e p separadas por camadas intrínsecas, as super-redes "nipi". A figura (1.4) representa um esquema da super-rede de  $Ga_{1-x}Al_xAs$ - $GaAs$  dopada modularmente com doadores e uma super-rede "nipi". Uma boa referência para sobre este assunto é o artigo de revisão de Ploog e Döhler [Pl 83]

Uma super-rede do tipo I, cujas barreiras sejam muito largas, pode ser

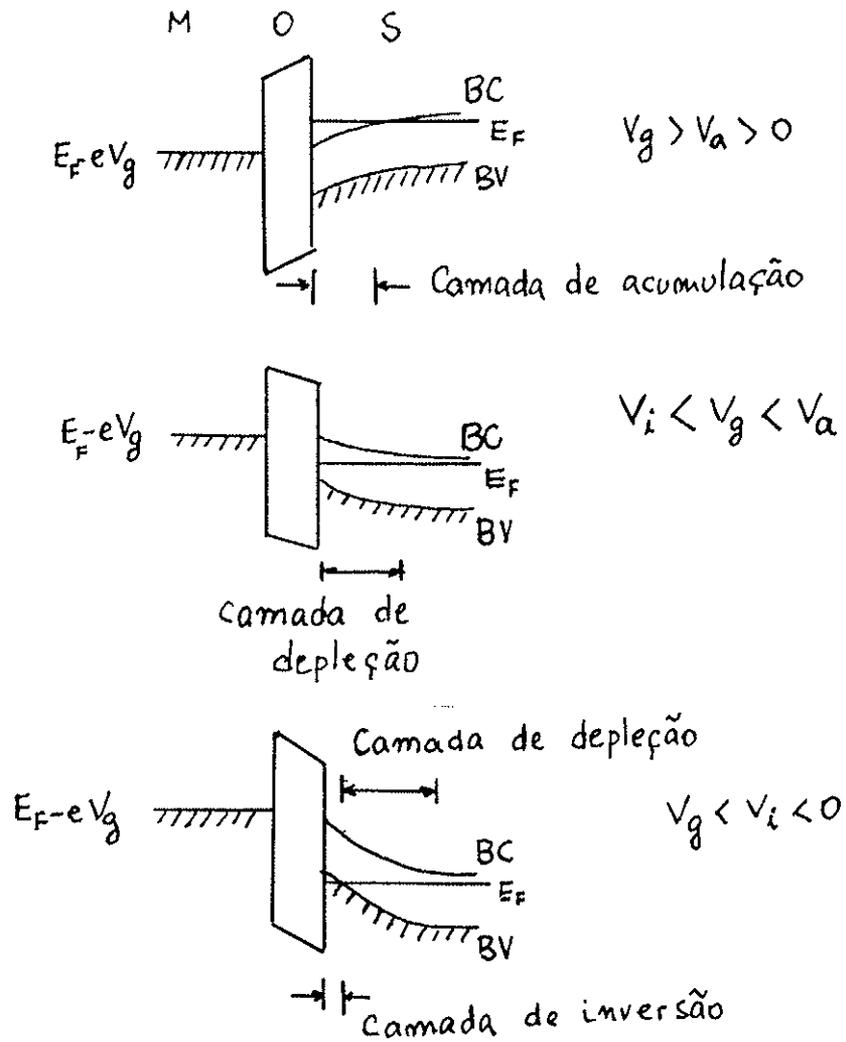


Figura 1.2: Esquema de bandas de energia em uma junção MOS, variando-se a voltagem de "gate".

M — metal      O — óxido      S — semicondutor  
 $E_F$  — Energia de Fermi  
 $V_a$  — Limiar da tensão de acumulação  
 $V_i$  — Limiar da tensão de inversão

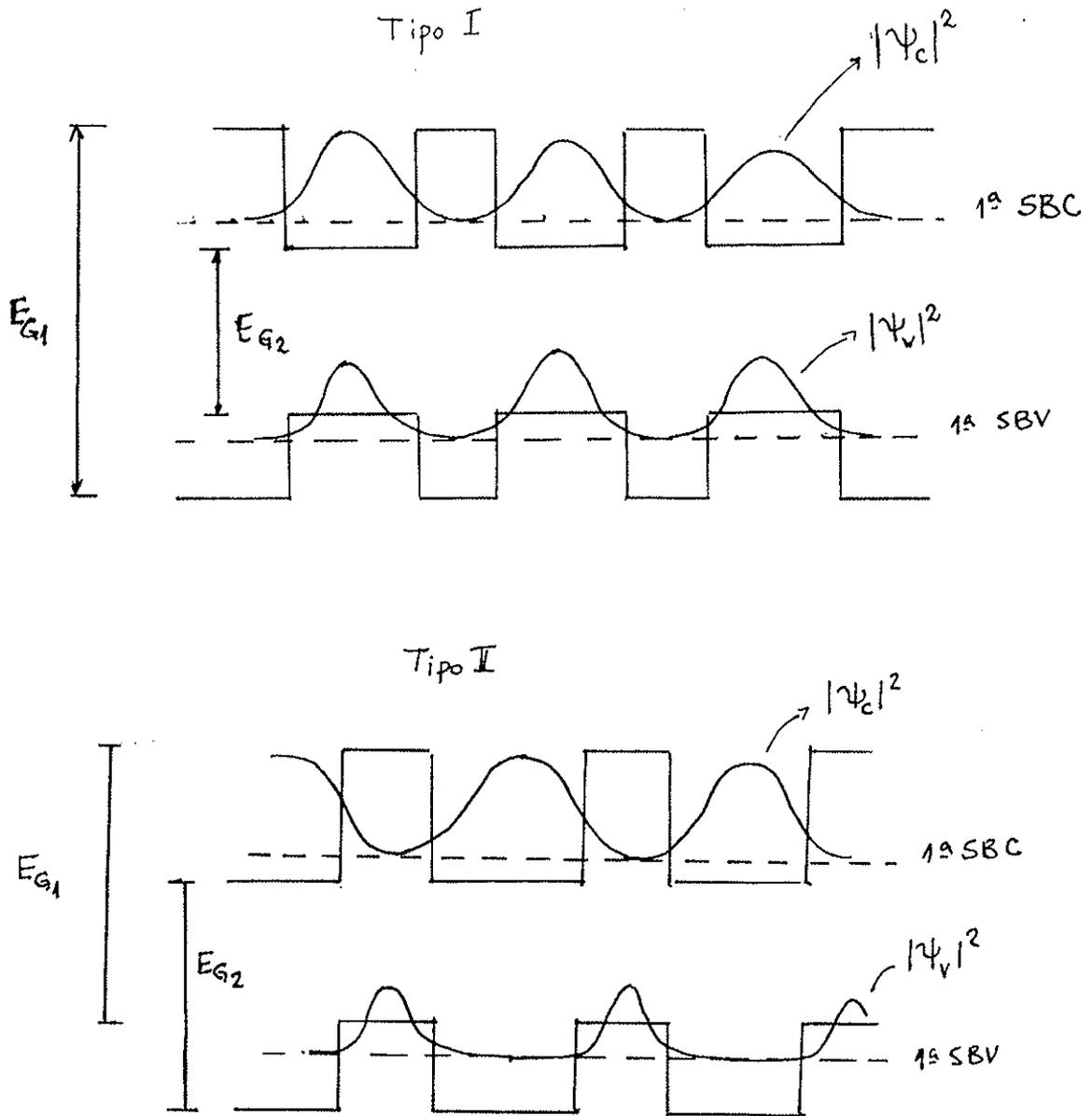


Figura 1.3: Super-redes composicionais dos tipos I e II  
 Nesta figura se encontram sobrepostos às bandas os gráficos da probabilidade de se encontrar elétrons ( $|\psi_c|^2$ ) e os buracos ( $|\psi_v|^2$ ).  $E_{G1}$  e  $E_{G2}$  são os intervalos das bandas proibidas dos dois materiais.

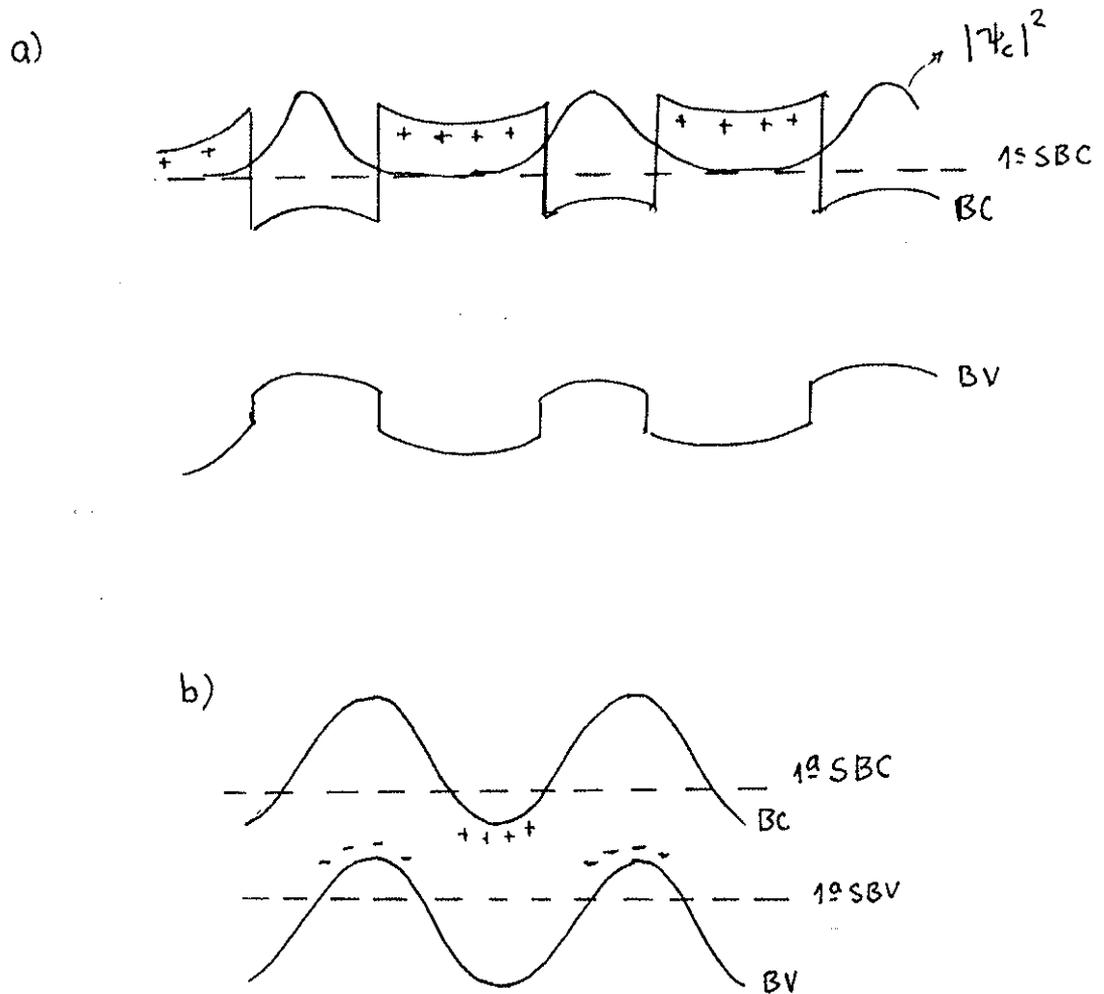


Figura 1.4: (a) Super-rede  $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs$  dopada modularmente com doadores e (b) super-rede dopada "nipi".  
Os sinais + e - indicam respectivamente doadores e aceitadores ionizados.

classificada como um poço quântico múltiplo. Nesse caso a superposição quântica das funções de onda dos elétrons ou buracos tende a zero e passamos do esquema de sub-bandas com vetores de onda na direção de crescimento para o de níveis quânticos  $N$  vezes degenerados, com  $N$  sendo o número de poços quânticos do sistema.

Nesta tese vamos focalizar a atenção em propriedades de poços quânticos dopados. A importância deste estudo é que as impurezas exercem grande influência nas propriedades eletrônicas e óticas destas estruturas. Como sabemos as impurezas geram portadores de carga para a condução, agem como centros espalhadores e providenciam novos caminhos para a recombinação de elétrons e buracos. Em termos de dispositivos eletrônicos, a presença de impurezas torna-se em alguns casos um ingrediente necessário para o seu funcionamento, enquanto que em outros ela limita seu desempenho.

O estudo de impurezas em poços quânticos foi feito por um grande número de autores. Bastard [Ba 81] e Bastard et al [Ba 83] calcularam o espectro de energias, a densidade de estados, bem como o coeficiente de absorção para a transição entre os níveis de energia  $1s$  e  $2p_{\pm}$  de um doador hidrogenóide em um poço quântico. Em seu cálculo foi usado um poço quântico com barreiras infinitas e função de onda do tipo de Slater(exponencial). Greene e Bajaj [Gr 83,Gr 85,Gr 88] calcularam o espectro de doadores para um poço quântico de barreira finita, com um campo magnético ora paralelo, ora perpendicular à direção de crescimento do poço. Nestes casos eles usaram uma base gaussiana de funções. É interessante observar os auto-estados do sistema para um campo magnético perpendicular à direção de crescimento. Outro trabalho importante foi desenvolvido por Mailhiot et al [Ma 82]. Nele os autores usaram o modelo de um poço finito, sem campo magnético e adicionaram ao hamiltoniano a interação do elétron com as cargas imagens, devido às diferenças das constantes dielétricas do poço e da barreira. A base de funções usada é a gaussiana. Oliveira e Pérez-Alvarez [Ol 89] calcularam os níveis fundamentais para doadores e aceitadores em poços quânticos com barreiras finitas e infinitas. A seguir obtiveram as probabilidades de transição por unidade de tempo entre os estados doador (aceitador) e a primeira sub-banda de valência (condução), comparando seus resultados com os de Bastard [Ba 81]. Chang et al [Ch 84,Ch 86,Ch 90] calcularam os níveis aceitadores através de expansões da função de onda em um conjunto de funções adequadamente escolhidas.

Fez parte de meu trabalho de tese o cálculo de energia de elétrons ligados

a doadores em poços quânticos. Seguem alguns trabalhos publicados sobre o assunto. Primeiramente, com Andrada e Silva e da Cunha Lima [Em 89], calculamos a densidade de estados de um poço quântico dopado e compensado, utilizando o modelo de dipolo. Neste trabalho é ajustada a curva  $E(z_i)$ , do estado fundamental de um elétron ligado a um doador, por um polinômio do quarto grau. Depois, juntamente com Colchesqui, de Andrada e Silva e da Cunha Lima [Co 89] calculamos a energia do estado fundamental de um doador em um poço quântico compensado. Neste artigo é obtida a densidade adjunta para a transição deste estado até a primeira sub-banda de condução. A seguir, com Leite e da Cunha Lima [Em 91] e com da Cunha Lima [Li 91] foram obtidos os níveis de energia, com número quântico principal  $n \leq 3$ . Nestes dois últimos trabalhos foram calculados coeficientes de absorção intra-impurezas na região do infravermelho distante (far infrared) para um poço quântico dopado com doadores sem e com compensação respectivamente.

Como observação vale notar que em todos os cálculos de impureza em um poço quântico citados são do tipo variacional, uma vez que os hamiltonianos destes sistemas não são separáveis em suas variáveis independentes.

Um fenômeno interessante que ocorre nos semicondutores é o alargamento não homogêneo das linhas espectrais de doadores em impurezas neutras, em um campo magnético [La 73, Ko 81]. Este alargamento provém de campos e gradientes de campos elétricos produzidos por impurezas ionizadas em semicondutores compensados de alta pureza. Nesta tese nos propomos a verificar este alargamento para doadores em poços quânticos. A distribuição aleatória de impurezas é gerada através da simulação Monte Carlo, por um método elaborado por Efros e Shklovskii [Ba 79, Sh 79, Sh 80]. As referências [Ba 88, Ko 80] mostram cálculos de campos e gradientes de campos elétricos para uma distribuição de impurezas em um semiconductor.

Resultados experimentais são encontrados nos trabalhos de Jarosik et al [Ja 85] e Shanabrook [Sh 87].

A seguir fazemos uma apresentação dos capítulos da tese.

No capítulo 2 são calculados os níveis de impurezas doadoras rasas em poços quânticos, em função do campo magnético aplicado. São discutidas duas formas de funções de onda e seus resultados comparados. Finalmente calcula-se a densidade de estados para uma distribuição uniforme de doadores.

No capítulo 3 é calculado o coeficiente de absorção para uma impureza doadora isolada em um poço quântico e, a seguir, é generalizado este resul-

tado para outras distribuições de impurezas.

No capítulo 4 é apresentado o método de simulação Monte Carlo para se gerar distribuições aleatórias de impurezas. Calcula-se então o coeficiente de absorção para um poço quântico dopado e compensado. É levado em consideração o efeito perturbativo do potencial eletrostático gerado pelas impurezas ionizadas (alargamento não homogêneo do coeficiente de absorção).

O capítulo 5 é dedicado a comentários e conclusões.

No apêndice A apresentamos o sistema efetivo de unidades, usados neste trabalho.

No apêndice B fazemos a expansão multipolar do potencial de uma carga puntiforme. Usamos o termo constante (ordem zero) desta expansão no cálculo do estado fundamental do poço dopado e compensado. Já os outros termos são usados no cálculo perturbativo dos níveis doadores.

No apêndice C apresentamos a solução do problema do átomo de hidrogênio confinado em duas dimensões. Este estudo é importante na determinação das funções de onda variacionais usadas no capítulo 2.

No apêndice D discorremos sobre o método variacional. É discutido o cálculo dos estados excitados e apresentado os resultados de um problema calculado algebricamente e variacionalmente. Finalmente mostramos o algoritmo usado para determinar os extremos de uma função.

No apêndice E são calculadas a polarização e a superposição de duas funções de onda do estado fundamental de um átomo hidrogenóide. Estes cálculos justificam as aproximações tomadas no capítulo 4.

No apêndice F apresentamos o cálculo analítico das integrais usadas no cálculo variacional para o caso de campo magnético nulo.

Finalmente no apêndice G anexamos cópias dos artigos publicados durante a realização desta tese.

## Capítulo 2

# Estados de impurezas doadoras rasas em poços quânticos

Estudaremos neste capítulo o cálculo dos níveis de energia de um elétron ligado a uma impureza doadora rasa situada em um poço quântico do tipo do formado pelos materiais GaAs e  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ . Veremos também o efeito do campo magnético sobre a energia do elétron ligado e calcularemos a densidade de estados de poços quânticos dopados uniformemente com doadores rasos.

Num semiconductor dopado, a baixas concentrações de impurezas doadoras rasas, o elétron adicional, que não participa das ligações covalentes da impureza com os átomos do cristal, é fracamente ligado à impureza. Portanto o nível situa-se logo abaixo do fundo da banda de condução e a função de onda do elétron apresenta um raio médio muito maior que o parâmetro de rede do material hospedeiro. Isto significa que a estrutura atômica da impureza tem pouca influência no estado do elétron ligado. Podemos tratar então a impureza como uma carga puntiforme imersa em um meio de constante dielétrica  $K$ . Dessa forma a interação entre o elétron e a impureza fica dada por:

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{Kr} . \quad (2.1)$$

A energia potencial (2.1) é a de um átomo hidrogenóide e esperamos então obter um espectro de energias similar ao do átomo de hidrogênio.

O método matemático para se tratar tal problema é o da AME, página (3),

[Lu 55, Ef 79, Ba 74, Ko 57]. Neste o hamiltoniano do sistema:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

onde  $m_0$  é a massa de repouso do elétron  $V(\mathbf{r})$  é a energia potencial cristalina e  $U(\mathbf{r})$  é a energia potencial da impureza (2.1), é substituído pelo hamiltoniano da massa efetiva ( $H_{ef}$ ). Para o caso de materiais com mínimo da banda de condução isotrópico, como é o caso dos materiais  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  com concentrações  $x \leq 0,4$ , vide figura (2.1), temos

$$H_{ef} = \frac{p^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde  $m^*$  é a massa efetiva do elétron definida por

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0}}, \quad (2.4)$$

onde  $k$  é o módulo do vetor da rede recíproca e a energia apresenta um mínimo isotrópico na origem da primeira zona de Brillouin.

A solução da equação de Schrödinger efetiva:

$$H_{ef}\chi(\mathbf{r}) = E\chi(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

nos fornece a função envelope  $\chi(\mathbf{r})$ , de modo que a função de onda do sistema fica dada por

$$\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

onde  $u(\mathbf{r})$  é a função de Bloch para o mínimo da banda de condução.

A função de onda (2.6) pode ser pensada como uma função de Bloch modulada suavemente pela função envelope  $\chi(\mathbf{r})$ , como vemos na figura (2.2). Nota-se que localmente a função de onda é a própria função de Bloch.

Uma vez que os estados excitados apresentam um raio médio maior que o do estado fundamental, a AME contribui com melhores resultados para estes estados. A tabela (2.1) nos mostra as energias de ligação para elétrons nos níveis  $1s$ ,  $2s$  e  $2p$ , calculadas através da AME e obtidas experimentalmente. Podemos notar que o desvio químico (*chemical shift*)<sup>1</sup> é muito pequeno para os vários dopantes apresentados, justificando a AME. Vemos também que a

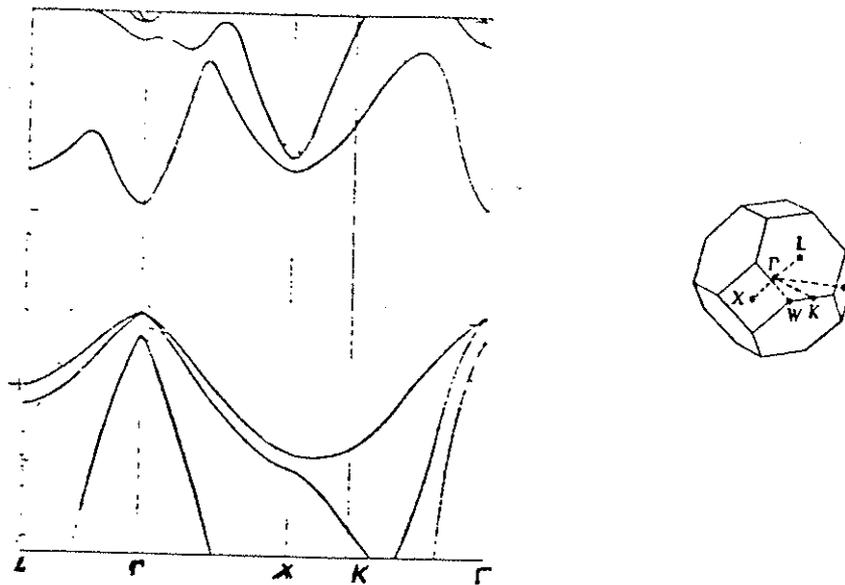


Figura 2.1: *Estrutura eletrônica de bandas para o GaAs*  
 Anexo os pontos de simetria representados na primeira zona de Brillouin para um cristal de rede cúbica.

Tabela 2.1: *Energias de ligação para os níveis 1s, 2s e 2p, de doadores rasos em GaAs.*

Dados obtidos da referência [Ba 74]. Energias em meV.

Nível	AME	Ge:	Se:	Sn:	Si:	S:
1s	5,67	6,08	5,89	5,87	5,81	6,1
2s, 2p	1,42			1,44		

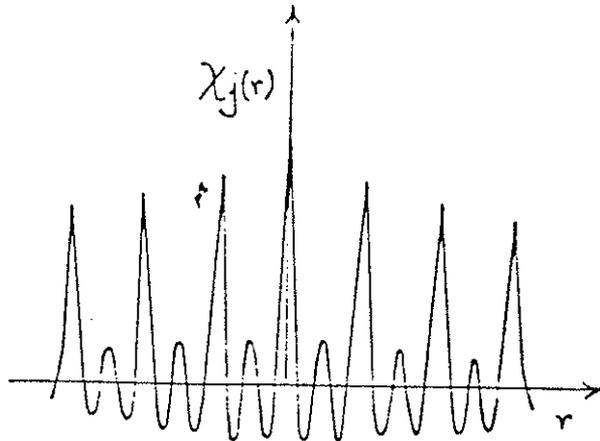


Figura 2.2: Representação esquemática da função de onda de um elétron ligado a uma impureza doadora rasa.

concordância entre a teoria e a experiência é melhor para os estados excitados.

A AME fica mais complexa para materiais cujos mínimos da banda de condução são anisotrópicos. No Si (Ge) há 6(4) mínimos equivalentes, situados em eixos de simetria da primeira zona de Brillouin. Uma outra situação complexa ocorre para níveis aceitadores rasos, uma vez que a banda de valência, para todos os semicondutores de rede cúbica, apresenta degenerescência. As referências [Ba 74, Ko 57, Ra 81] detalham estes cálculos.

Para um poço quântico do tipo AlGaAs-GaAs-AlGaAs, dopado com doadores rasos, a situação é mais complexa pois ocorrem mudanças estruturais abruptas entre os materiais que formam o poço (GaAs) e as barreiras (AlGaAs), uma vez que estes materiais apresentam massas efetivas, constantes dielétricas e energias de bandas proibidas diferentes.

Para concentrações ( $x$ ) de Al em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  tais que a banda proibida

<sup>1</sup>Alteração na energia de um nível hidrogenóide devido ao caroço da impureza .

se mantém direta<sup>2</sup> [Ca 78],

$$x < 0,45, \quad (2.7)$$

temos

$$m^* = (0,067 + 0,083x)m_0 \quad (2.8)$$

$$K = 13,1 - 3,0x \quad (2.9)$$

$$V_0 = 1,247px, \quad (2.10)$$

sendo  $m_0$  a massa efetiva de repouso do elétron,  $K$  a constante dielétrica e  $V_0$  o "offset" da banda de condução. O fator  $p$  significa a fração da diferença entre as energias das bandas proibidas dos materiais que se encontra na banda de condução. Essa porcentagem varia de 0,60 a 0,85 [Ol 89, Gr 83, Ma 82]. Há também a aproximação de Bastard [Ba 81] de poço quântico infinito,

$$V_0 \rightarrow \infty, \quad (2.11)$$

da qual faremos uso neste trabalho.

O uso da AME para cálculo em heterojunções requer condições de contorno nas interfaces que dependem dos tipos de materiais empregados. Na referência [Ba 90] podemos ter uma idéia da complexidade destas condições de contorno, porém, para o caso de heterojunções do tipo GaAs-AlGaAs (semicondutores de banda proibida larga) podemos usar o modelo de Ben-Daniel&Duke [Be 66]. Nele as condições para a função envelope na interface ( $z = z_0$ ) são:

$$\chi_1(z_{0-}) = \chi_2(z_{0+}) \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d\chi_1(z_{0-})}{dz} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d\chi_2(z_{0-})}{dz}. \quad (2.13)$$

Esta última condição reflete a continuidade da densidade de corrente através da heterojunção. Em nosso trabalho, uma vez considerado um poço infinito, teremos a função envelope se anulando nos limites do poço, ou seja,

$$\chi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0. \quad (2.14)$$

---

<sup>2</sup>Máximo da banda de valência e mínimo da banda de condução ocorrendo no mesmo ponto da rede recíproca.

Ao fazermos esta aproximação estamos desprezando a penetração da função de onda nas barreiras. A consequência desta aproximação é a elevação dos níveis energéticos do poço quântico. Esta elevação é maior para as sub-bandas de condução do que para os níveis ligados de impurezas doadoras rasas, uma vez que nestas últimas o elétron já está confinado pela energia potencial atrativa da impureza.

Para estimarmos o aumento da energia da primeira sub-banda de condução em um poço quântico, quando fazemos a aproximação de poço quadrado infinito, vamos supor que a massa efetiva do elétron seja constante, igual à do elétron situado no material tipo poço (GaAs). Esta aproximação é feita por Greene e Bajaj [Gr 83]. Supondo-se uma concentração de 40% de Al, temos que a altura do poço é de 50 Ry\*. O cálculo da energia do primeiro nível de um poço de potencial se encontra em vários livros de Mecânica Quântica. Segundo Landau e Lifshitz [La 66] temos que o primeiro nível de um poço simétrico de largura  $L$  e altura  $V_0$  é dado por

$$E = \gamma^2 V_0 \xi^2 \quad (2.15)$$

com

$$\gamma = \frac{\hbar}{L} \left( \frac{2}{mV_0} \right)^{1/2} \quad (2.16)$$

e  $\xi$  obtido da resolução da equação transcendental

$$\cos \xi = \gamma \xi \quad (2.17)$$

com

$$0 \leq \xi \leq \frac{\pi}{2}. \quad (2.18)$$

Tomando-se o poço infinito, a solução se reduz a :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (2.19)$$

Na figura (2.3) vemos as energias da primeira sub-banda para os poços finito e infinito em função da largura do poço. Já na figura (2.4) vemos a diferença entre as energias dos dois tipos de poços. À medida que a largura do poço aumenta, a diferença entre elas torna-se desprezível. Em consequência, o modelo de poço infinito torna-se mais realístico, quanto maior for a largura do poço.

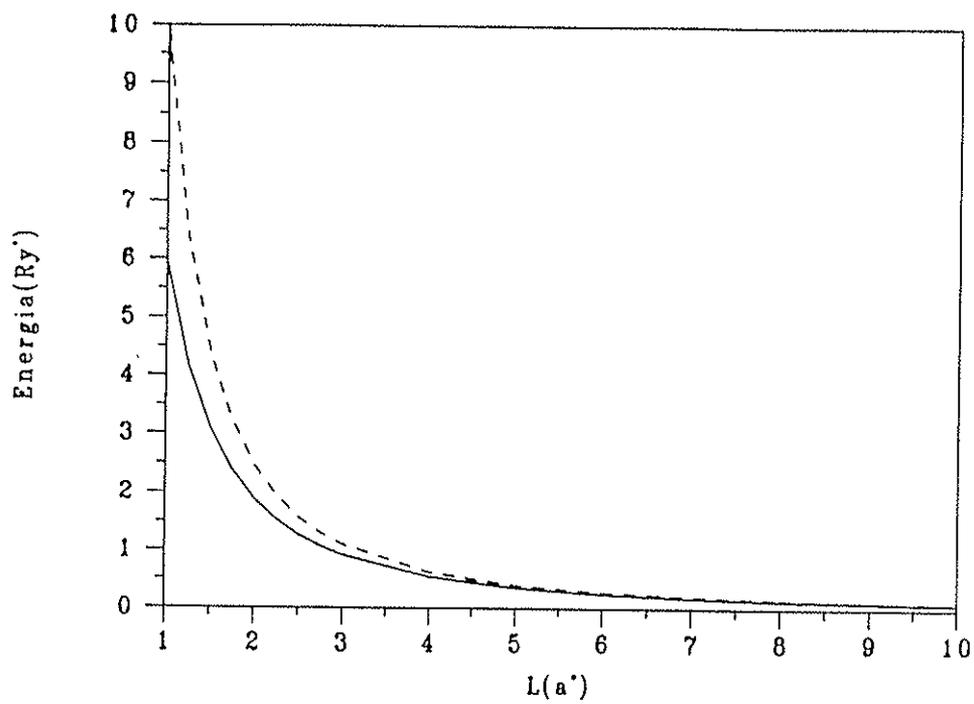


Figura 2.3: Energia da primeira sub-banda para poços quânticos finito e infinito, em função da largura do poço .

Linha tracejada — poço quântico infinito

Linha contínua — poço quântico finito ( $V_0 = 50 \text{ Ry}^*$ ).

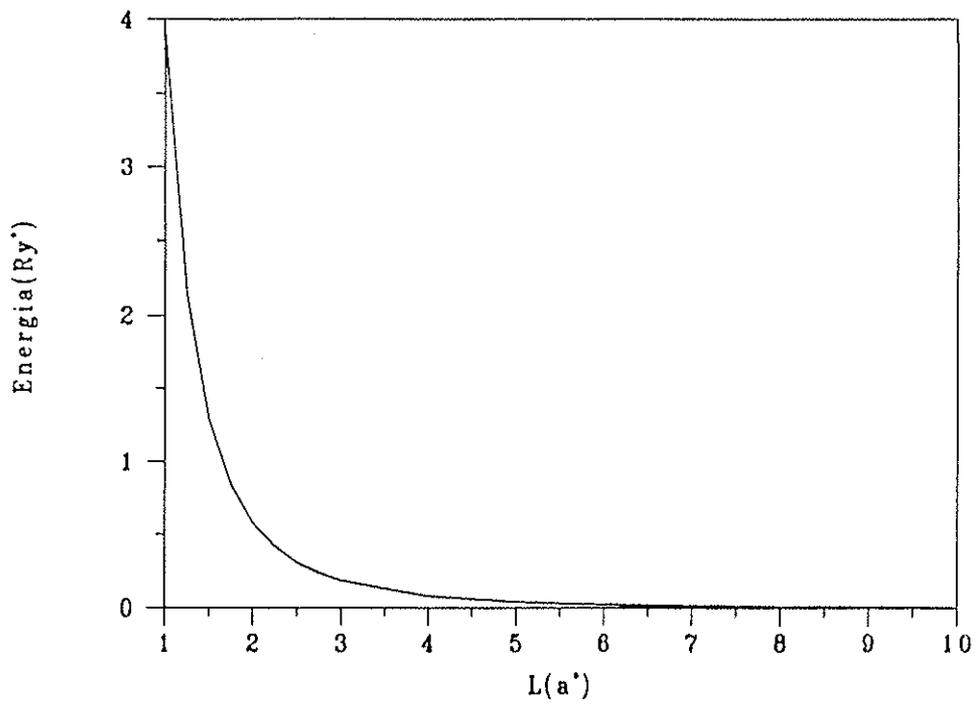


Figura 2.4: *Diferença das energias da primeira sub-banda dos poços infinito e finito ( $V_0 = 50 Ry^*$ ) .*

Vamos definir um poço quântico infinito de largura  $L$ , crescendo ao longo do eixo  $z$  e com a origem das coordenadas igualmente distanciada das paredes do poço. Dessa forma o poço quântico fica caracterizado pela energia potencial:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{se } |z| < L/2 \\ \infty, & \text{se } |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2.20)$$

O estudo de um elétron ligado a uma impureza doadora em um poço quântico pode levar em conta, além da energia de interação eletrostática entre o elétron e o centro doador, a energia eletrostática gerada por cargas de polarização, devido à alteração da constante dielétrica, quando passamos de um material a outro np poço quântico.

Podemos calcular esta última energia através do método das cargas imagens, cujas posições são dadas por

$$z_0^\pm(n) = z_i \pm 2 \left\{ \left( n - \left[ \frac{n+1}{2} \right] \right) \left( \frac{L}{2} \pm z_i \right) + \left[ \frac{n+1}{2} \right] \left( \frac{L}{2} \mp z_i \right) \right\}, \quad (2.21)$$

sendo  $[x]$  a parte inteira de  $x$ . Dessa forma a energia potencial devido às cargas imagens fica sendo:

$$V_I(\mathbf{r}) = V_I^+(\mathbf{r}) + V_I^-(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

com

$$V_I^\pm(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{K} \sum_{n=1}^{\infty} p^n \left( \rho^2 + [z - z_0^\pm(n)]^2 \right)^{-1/2}, \quad (2.23)$$

$$p = \frac{K - K_b}{K + K_b} \quad (2.24)$$

e

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (2.25)$$

onde  $K_b$  é a constante dielétrica do material que forma a barreira. Mailhiot et al [Ma 82] incluíram o efeito desta energia potencial no cálculo dos níveis de energia de um elétron ligado a um doador em um poço quântico. Para concentrações de Al até 0,4,  $p$  é no máximo da ordem de 0,05. Poucos termos são importantes nas séries (2.23) e, além disso, dão contribuições muito menores que a gerada pela carga real (centro doador). Por isso a contribuição destes termos não é muito significativa. Em nossos cálculos desprezamos também estes termos.

Uma vez feitas estas considerações passemos ao cálculo dos níveis de doadores rasos em um poço quântico, primeiramente na ausência de um campo magnético. Devemos procurar soluções para o seguinte hamiltoniano:

$$H(z_i) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Ku} + V(z), \quad (2.26)$$

onde

$$u = (x^2 + y^2 + (z - z_i)^2)^{1/2} \quad (2.27)$$

a distância do elétron à impureza doadora, localizada em

$$\mathbf{R}_i = (0, 0, z_i). \quad (2.28)$$

O espectro energético deste sistema deve depender da largura do poço e da posição da impureza dentro do poço. Analisando o hamiltoniano (2.26), verificamos que as variáveis  $z$  e  $\rho$  não se separam, de modo que a solução procurada deve ser obtida a partir do cálculo variacional.

A procura das funções de onda é um passo importantíssimo. Neste trabalho, seguimos o caminho trilhado por Bastard [Ba 81] e escrevemos as funções de onda como produtos da função de onda do mínimo da subbanda de condução por uma função hidrogenóide. Outros pesquisadores [Gr 83, Ma 82] utilizam funções gaussianas em vez das hidrogenóides.

No transcorrer deste doutoramento propusemos dois tipos destas funções. Em ambos estabelecemos o produto de polinômios por exponenciais. Inicialmente ajustamos os coeficientes destes polinômios de modo a obter os limites do átomo de hidrogênio em três dimensões e confinado a duas dimensões para poços muito largos e muito estreitos, respectivamente. A última coluna da tabela (C.1) nos dá os polinômios para vários estados, para o caso do confinamento em duas dimensões. Temos também tabelados os valores do coeficiente de  $\rho$  ( $\gamma_N$ ) que aparece nas exponenciais. Valores correspondentes aos do átomo de hidrogênio não confinado são encontrados em vários livros de Mecânica Quântica. Na tabela (2.2) listamos as partes radiais das funções de onda hidrogenóides discutidas acima. Como temos uma situação intermediária entre estes dois estados escrevemos nossas funções hidrogenóides como:

$$R(u) = P_n(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (2.29)$$

onde

$$P_n(v) = 1 + a_1(L)v + a_2(L)v^2 + \dots + a_n(L)v^n, \quad (2.30)$$

Tabela 2.2: *Parte radial das funções de onda do átomo de hidrogênio confinado em duas dimensões e não confinado.*

A unidade de comprimento usada é o raio de Bohr efetivo ( $a^*$ ).

Estado	F. O. confinada	F. O. não confinada
1s	$\exp[-2r]$	$\exp[-r]$
2s	$(1 - 2\frac{2}{3}r) \exp[-\frac{2}{3}r]$	$(1 - 2\frac{1}{2}r) \exp[-\frac{1}{2}r]$
2p $_{\pm}$	$r \exp[-\frac{2}{3}r]$	$r \exp[-\frac{1}{2}r]$
3s	$(1 - 4\frac{2}{5}r + 2(\frac{2}{5}r)^2) \exp[-\frac{2}{5}r]$	$(1 - 2\frac{1}{3}r + \frac{2}{3}(\frac{1}{3}r)^2) \exp[-\frac{1}{3}r]$
3p $_{\pm}$	$r(1 - \frac{2}{3}\frac{2}{5}r) \exp[-\frac{2}{5}r]$	$r(1 - \frac{1}{2}\frac{2}{3}r) \exp[-\frac{1}{3}r]$
3d $_{\pm 2}$	$r^2 \exp[-\frac{2}{5}r]$	$r^2 \exp[-\frac{1}{3}r]$

Tabela 2.3: Coeficientes  $a_j(L)$  para os limites  $L \rightarrow 0$  e  $L \rightarrow \infty$ .

L	$a_1^{2s}$	$a_1^{3s}$	$a_2^{3s}$	$a_1^{3p_{\pm}}$
$\infty$	-1	-2	2/3	-1/2
0	-2	-4	2	-2/3

sendo  $a_i(L)$  coeficientes ajustáveis de modo a se obter as funções de onda da tabela (2.2), para os limites de  $L$  tendendo a 0 e a  $\infty$ .  $\kappa$  é o parâmetro variacional. Por exemplo, para o estado  $2s$  teríamos  $\kappa = 2/3$  e  $a_1(0) = -2$  para  $L = 0$ , enquanto que para  $L \rightarrow \infty$ ,  $\kappa = 1/2$  e  $a_1(\infty) = -1$ .

Uma função que interpola os valores  $a_n(0)$  e  $a_n(\infty)$ , pode ser tomada, arbitrariamente, como sendo :

$$a_j(L) = \left( \frac{a_n(\infty) - a_n(0)}{2} \right) \tanh(L - L_M) + \left( \frac{a_n(\infty) + a_n(0)}{2} \right), \quad (2.31)$$

sendo  $L_M$  um valor de  $L$  intermediário. Na prática, tomamos  $L = 5a^*$ . A tabela (2.3) nos dá os valores de  $a_n(0)$  e  $a_n(\infty)$  usados para funções hidrogênicas de estados com  $n \leq 3$  (número quântico principal).

As funções de onda procuradas são então da forma:

$$\phi_{ns}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{SB}(z) P_{n-1}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (2.32)$$

$$\phi_{np_{\pm}}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{SB}(z) \rho e^{\pm i\varphi} P_{n-2}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (2.33)$$

$$\phi_{nd_{2\pm}}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{SB}(z) \rho^2 e^{\pm 2i\varphi} P_{n-3}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (2.34)$$

onde

$$\Phi_{SB}(z) = \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \quad (2.35)$$

é a função de onda do mínimo da primeira sub-banda de condução. O grau do polinômio indica o número de superfícies nodais das funções. Os estados  $np_{\pm}$  e  $nd_{\pm 2}$  apresentam também uma linha nodal em  $\rho = 0$ . As exponenciais imaginárias refletem o fato das funções (2.32,2.33,2.34) serem auto-funções da componente  $z$  do momento angular. Este fato nos garante a ortogonalidade

entre as funções de  $m_z$ 's diferentes. Resta-nos então ortogonalizar as funções de mesmo  $m_z$ , através do método de Schmidt. Rescrevemos então as funções como:

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = A_{1s}\phi_{1s}(\alpha, \mathbf{r}) \quad (2.36)$$

$$\Psi_{2s}(\mathbf{r}) = A_{2s}[\phi_{2s}(\kappa, \mathbf{r}) - \chi\Psi_{1s}(\mathbf{r})] \quad (2.37)$$

$$\Psi_{2p\pm}(\mathbf{r}) = A_{2p}\phi_{2p\pm}(\gamma, \mathbf{r}) \quad (2.38)$$

$$\Psi_{3s}(\mathbf{r}) = A_{3s}[\phi_{3s}(\eta, \mathbf{r}) - \lambda\Psi_{1s}(\mathbf{r}) - \zeta\Psi_{2s}(\mathbf{r})] \quad (2.39)$$

$$\Psi_{3p\pm}(\mathbf{r}) = A_{3p}[\phi_{3p\pm}(\mu, \mathbf{r}) - \epsilon\Psi_{2p\pm}(\mathbf{r})] \quad (2.40)$$

$$\Psi_{3d2\pm}(\mathbf{r}) = A_{3d2}\phi_{3d2\pm}(\nu, \mathbf{r}). \quad (2.41)$$

Os coeficientes  $A_{1s}$ ,  $A_{2s}$  ... são constantes de normalização. Os coeficientes  $\chi$ ,  $\lambda$ ,  $\zeta$  e  $\epsilon$  são os coeficientes de ortogonalização. Os parâmetros variacionais, um para cada função de onda, são dados por  $\alpha$ ,  $\kappa$ ,  $\gamma$ ,  $\eta$ ,  $\mu$  e  $\nu$ .

Calcula-se variacionalmente os níveis de energia de uma família de estados com mesmo  $m_z$ , começando pelo estado de  $n$  mais baixo e vai-se sucessivamente obtendo os níveis para valores progressivos de  $n$ . Para um determinado nível, fixando-se o parâmetro variacional, obtém-se as constantes de normalização e ortogonalização. Varia-se então o parâmetro variacional até obter-se um extremo para o funcional da energia:

$$E_n(\kappa) = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle. \quad (2.42)$$

Como observação podemos salientar que as constantes de normalização e de ortogonalização dos níveis  $p$  e  $d$  são independentes do sinal de  $m_z$ . Assim temos

$$A_{2p+} = A_{2p-} = A_{2p}, \quad (2.43)$$

etc.

Com este tipo de função escrevemos os artigos [Em 91, Li 91]. Posteriormente, no intuito de simplificar os cálculos e extrapolá-los para sistemas com campo magnético aplicado, consideramos as seguintes funções:

$$\psi_{ns}(\mathbf{r}) = A_{ns}\Phi_{SB}(z)P_{n-1}(u)e^{-\kappa ns u}, \quad (2.44)$$

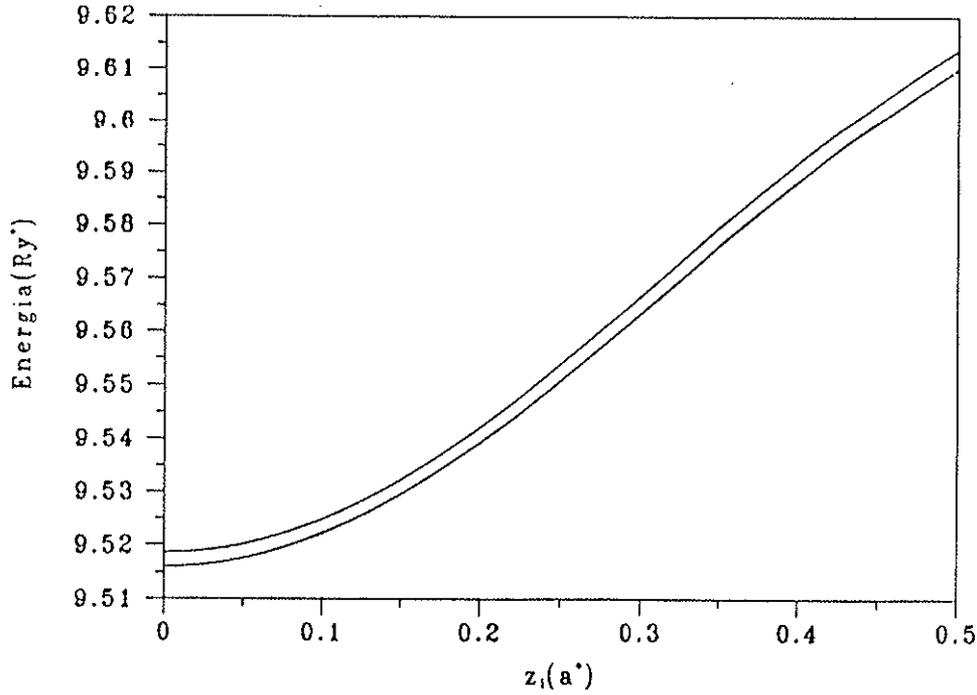


Figura 2.5: Energias do nível  $2s$  segundo dois tipos de funções variacionais  
 Curva superior — função (2.37)  
 Curva inferior — função (2.44)

$$\psi_{np_{\pm}}(\mathbf{r}) = A_{np} \Phi_{SB}(z) \rho e^{\pm i\varphi} P_{n-2}(u) e^{-\kappa_{np}u}, \quad (2.45)$$

$$\psi_{nd_{2\pm}}(\mathbf{r}) = A_{nd} \Phi_{SB}(z) \rho^2 e^{\pm 2i\varphi} P_{n-3}(u) e^{-\kappa_{nd}u}, \quad (2.46)$$

Neste conjunto de funções, os polinômios

$$P_n(u) = 1 + a_1 u + a_2 u^2 + \dots + a_n u^n \quad (2.47)$$

são compostos de coeficientes  $a_i$ , que são determinados através de condições de ortogonalidade. Com o novo conjunto de funções obtemos energias que são ligeiramente menores que as anteriores, como podemos observar nas figuras (2.5), (2.6) e (2.7). Convém notar que os níveis  $1s$ ,  $2p_{\pm}$  e  $3d_{\pm 2}$  são calculados da mesma forma nos dois casos.

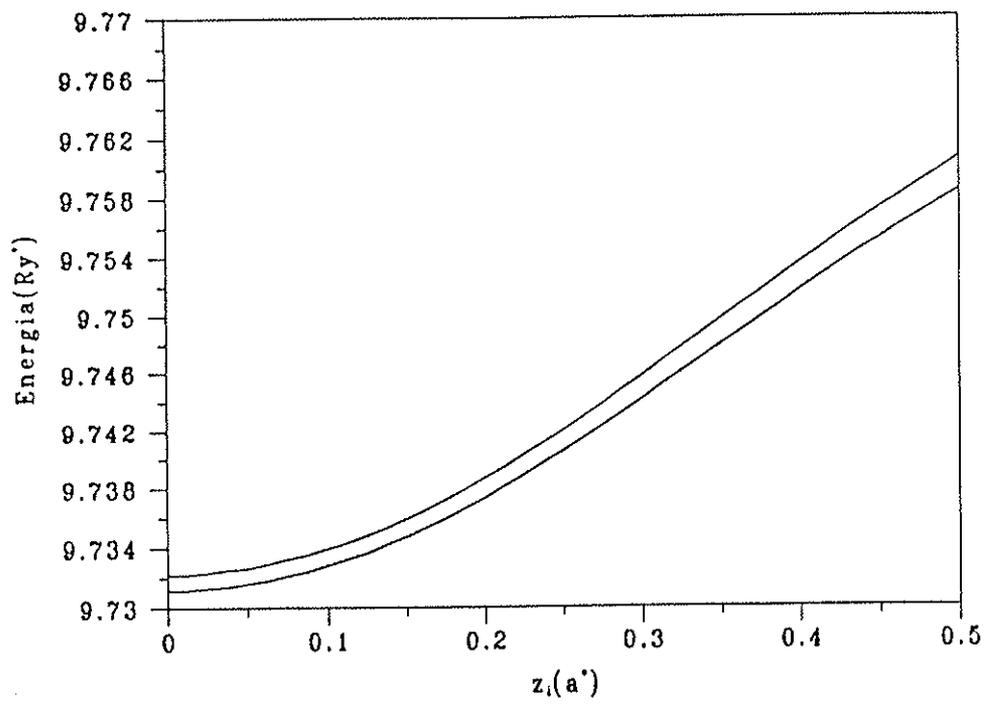


Figura 2.6: Energias do nível 3s segundo dois tipos de funções variacionais.  
 Curva superior — função (2.39)  
 Curva inferior — função (2.44)

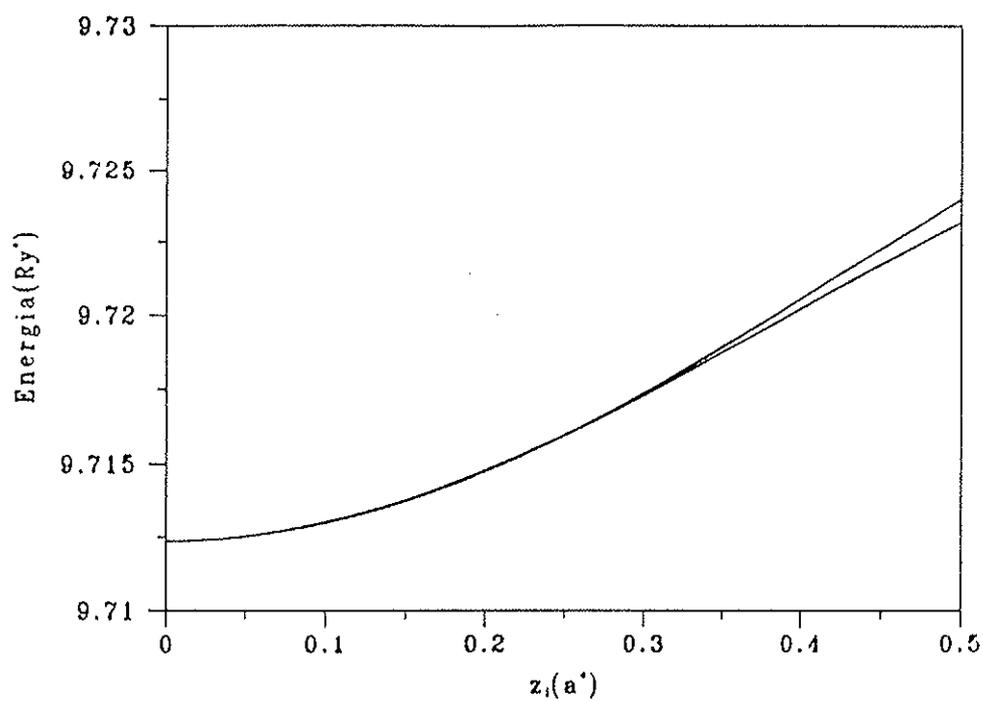


Figura 2.7: *Energias do nível 3p segundo dois tipos de funções variacionais.*  
 Curva superior — função (2.40)  
 Curva inferior — função (2.44)

Todas as integrais usadas neste cálculo variacional são exatas, como é mostrado no apêndice (F). Nas figuras (2.8) e (2.9) vemos os níveis de energia para dois comprimentos de de poços diferentes,  $L = 1a^*$  e  $L = 4a^*$ , respectivamente. Chamamos a atenção para a mudança das escalas de energia, ambas em unidades efetivas ( $Ry^*$ ). Podemos notar que a energia do estado  $1s$ , para uma impureza central, se aproxima do valor  $-1,0Ry^*$ , que é a energia deste estado para um átomo hidrogenóide não confinado, à medida que a largura do poço aumenta. Em termos das energias de ligação temos, para uma impureza central, valores situados na região intermediária entre os limites totalmente confinado (2D) e livre (3D). As figuras (2.10), (2.11) e (2.12) mostram as energias de ligação de diversos níveis de uma impureza doadora rasa central, ao se variar a largura do poço quântico.

Calculemos agora o efeito de um campo magnético uniforme, estático, perpendicular às paredes do poço sobre os níveis de energia de um elétron ligado à uma impureza em um poço quântico. O interesse em se aplicar um campo magnético é o de quebrar a degenerescência dos níveis  $p$  e  $d$ , alterar as funções de onda, aumentando o confinamento dos elétrons.

Tal campo pode ser obtido através do potencial vetor

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}(-y, x, 0), \quad (2.48)$$

onde  $B$  é o módulo do campo magnético. Podemos notar que

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.49)$$

caracterizando o calibre de Coulomb.

Introduz-se a interação do elétron com o campo magnético através de duas mudanças no hamiltoniano do sistema, primeiramente fazendo-se a substituição

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} - \frac{(-e)}{c} \mathbf{A} \quad (2.50)$$

e adicionando-se o termo de interação do momento magnético do elétron com o campo magnético

$$H_{SB} = \frac{e}{m^*c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (2.51)$$

$$= \frac{e}{m^*c} S_z B, \quad (2.52)$$

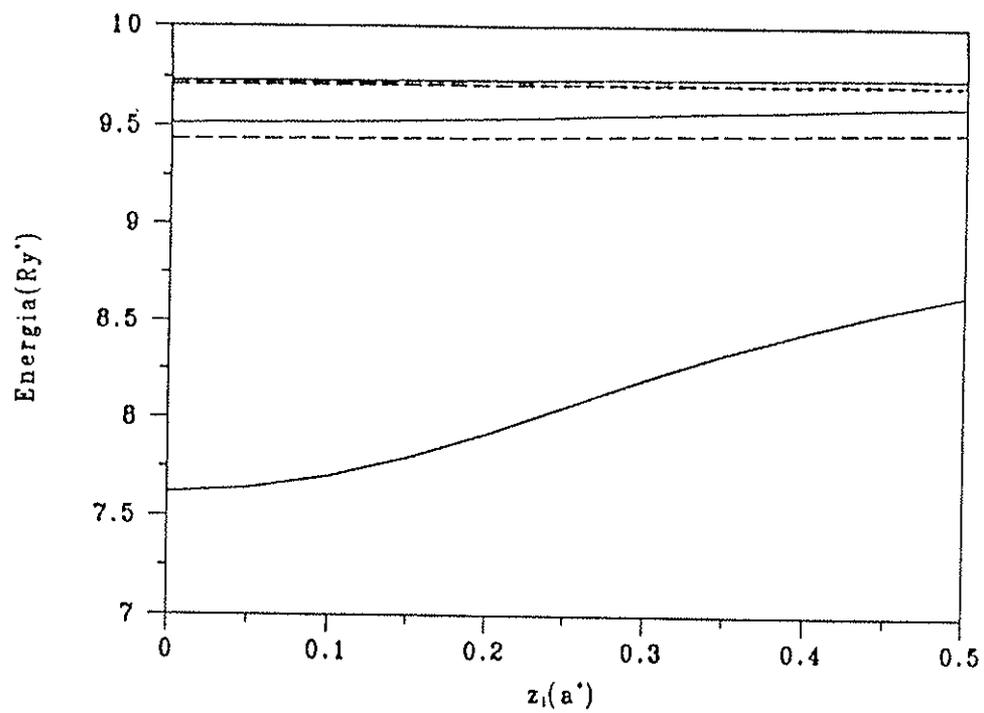


Figura 2.8: Energias dos estados ligados para uma impureza em um poço quântico de largura  $1a^*$

Linhas tracejadas — níveis  $np_{\pm}$ .

Linhas contínuas — níveis  $ns$ .

Linha pontilhada — nível  $3d_{\pm 2}$

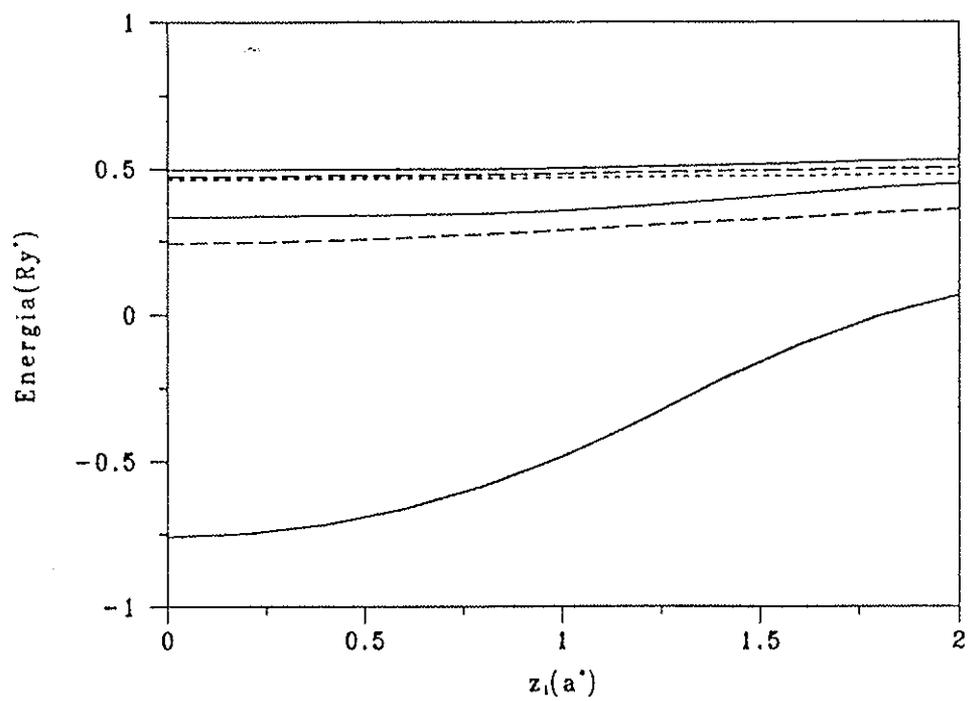


Figura 2.9: *Energias dos estados ligados para uma impureza em um poço quântico de largura  $4a^*$*   
 Linhas tracejadas — níveis  $np_{\pm}$ .  
 Linhas contínuas — níveis  $ns$ .  
 Linha pontilhada — nível  $3d_{\pm 2}$

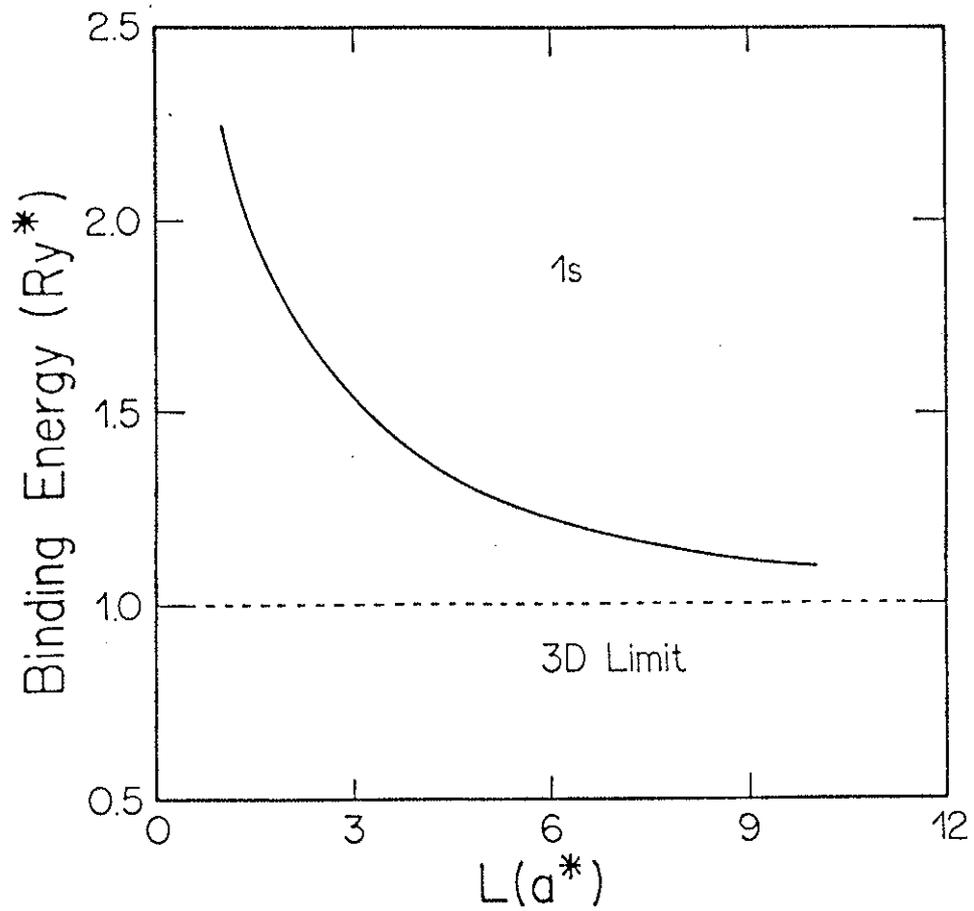


Figura 2.10: *Energias de ligação para estados com  $n = 1$  de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço . A linha pontilhada indica o limite de não confinamento (3D).*

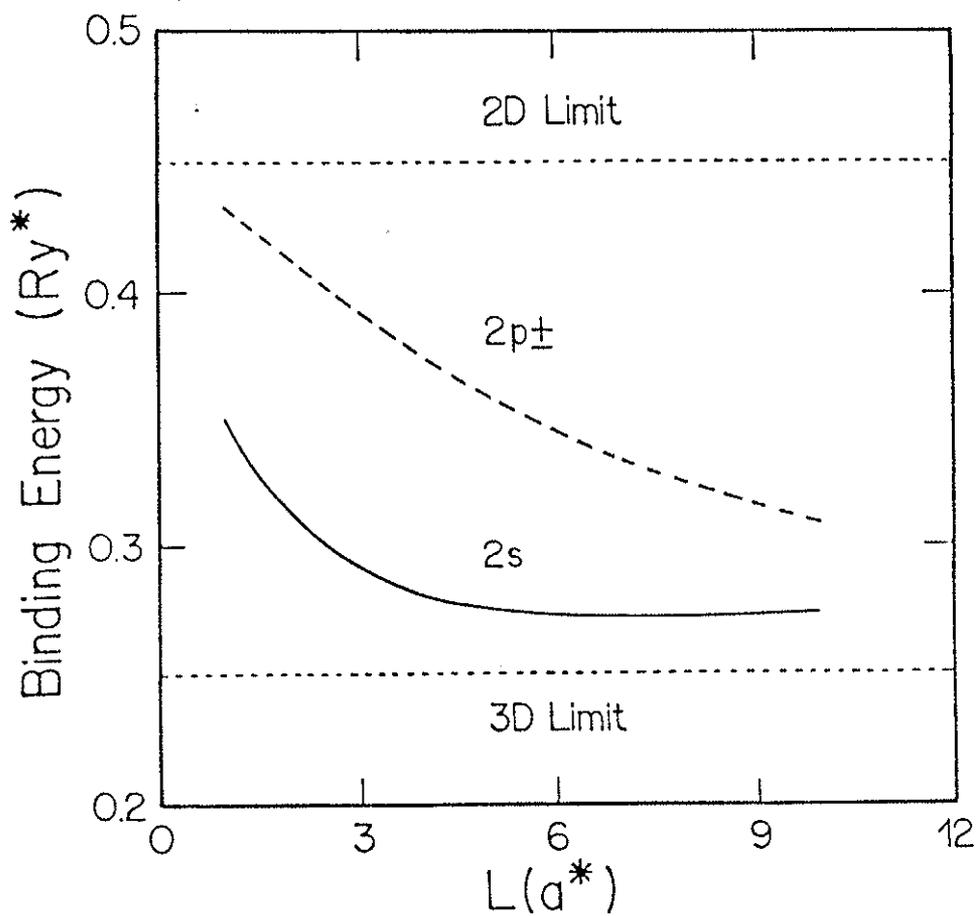


Figura 2.11: *Energias de ligação para estados com  $n = 2$  de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço .*  
 As linhas pontilhadas indicam os limites de não confinamento (3D) e de confinamento total em duas dimensões (2D).

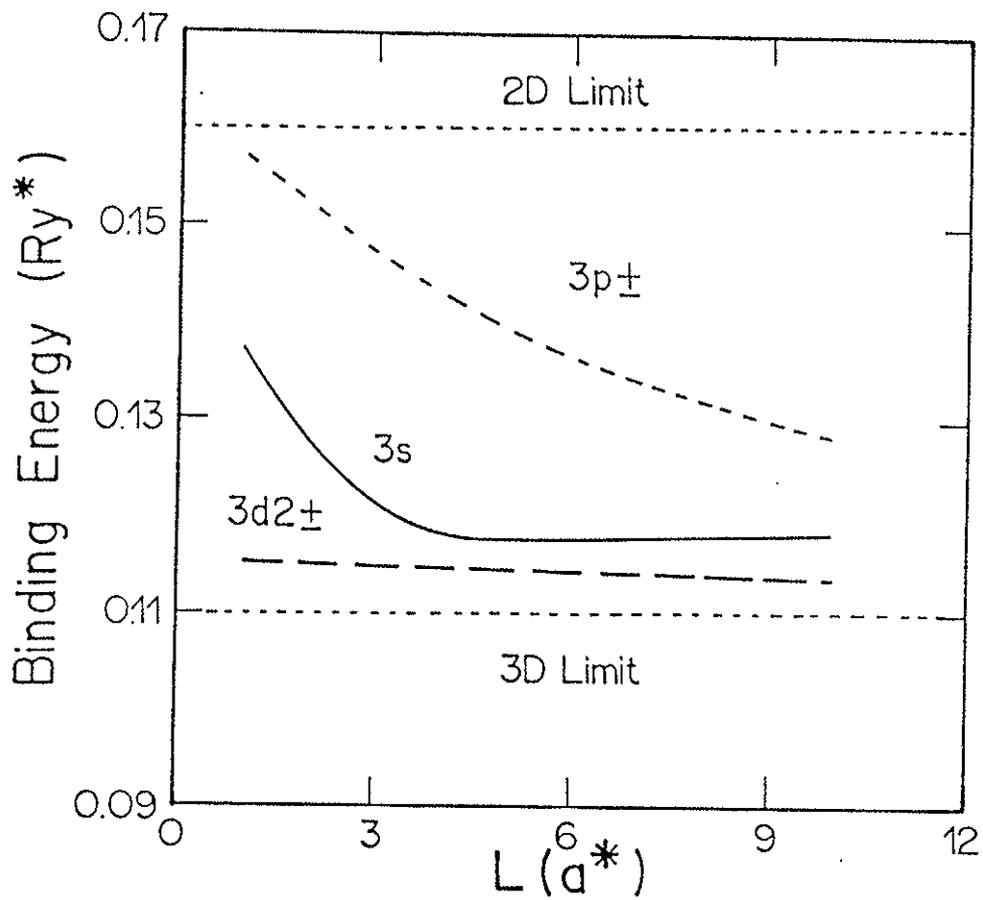


Figura 2.12: Energias de ligação para estados com  $n = 3$  de uma impureza central em um poço quântico em função da largura do poço . As linhas pontilhadas indicam os limites de não confinamento (3D) e de confinamento total em duas dimensões (2D).

temos

$$H(z_i) = \frac{1}{2m^*} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{Ku} + V(z) + \frac{e}{m^*c} S_z B. \quad (2.53)$$

Observamos que  $S_z$  comuta com o hamiltoniano (2.53), portanto podemos substituí-lo pelo seu autovalor  $\hbar m_s$ , no último termo do hamiltoniano.

Desenvolvendo-se o termo quadrático do hamiltoniano (2.53) e levando-se em conta a propriedade (2.49) temos

$$H(z_i) = \frac{1}{2m^*} \left( p^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 \rho^2 + 2 \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right) - \frac{e^2}{Ku} + V(z) + m_s \hbar \frac{eB}{m^*c}. \quad (2.54)$$

Substituindo-se  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{A}$  na expressão (2.54) obtemos

$$H(z_i) = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{e^2 B^2}{8m^*c^2} \rho^2 + \frac{eB}{2m^*c} L_z - \frac{e^2}{Ku} + V(z) + m_s \hbar \frac{eB}{m^*c}. \quad (2.55)$$

Utilizando-se o sistema efetivo de unidades, vide apêndice (A), temos, em termos da frequência de ciclotron efetiva,

$$\omega_c^* = \frac{eB}{m^*c}, \quad (2.56)$$

o seguinte hamiltoniano

$$H(z_i) = -\nabla^2 - \frac{2}{u} + \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_c^*}{Ry^*} \frac{L_z}{\hbar} + \frac{1}{16} \left( \frac{\hbar \omega_c^*}{Ry^*} \right)^2 \rho^2 + V(z) + m_s \frac{\hbar \omega_c^*}{Ry^*} \quad (2.57)$$

ou, definindo-se o parâmetro  $\gamma$  como sendo

$$\gamma = \frac{\hbar \omega_c^*}{Ry^*} \quad (2.58)$$

temos finalmente:

$$H(z_i) = -\nabla^2 - \frac{2}{u} + \frac{\gamma}{\hbar} \left( \frac{1}{2} L_z + S_z \right) + \frac{1}{16} \gamma^2 \rho^2 + V(z), \quad (2.59)$$

Uma vez que esperamos um confinamento eletrônico numa direção perpendicular ao campo magnético aplicado e levando-se em conta a forma

harmônica da energia potencial ( $1/16\gamma^2\rho^2$ ), escrevemos as funções de onda variacionais como um produto das funções para campo magnético nulo (2.44), (2.45) e (2.46) com gaussianas. Temos então o seguinte conjunto de funções com dois parâmetros variacionais:

$$\psi_{ns}(\mathbf{r}) = A_{ns}\Phi_{SB}(z)P_{n-1}(u)e^{-(\kappa_{ns}u+\eta_{ns}\rho^2)}, \quad (2.60)$$

$$\psi_{np\pm}(\mathbf{r}) = A_{np}\Phi_{SB}(z)\rho e^{\pm i\varphi}P_{n-2}(u)e^{-(\kappa_{np}u+\eta_{np}\rho^2)}, \quad (2.61)$$

$$\psi_{nd2\pm}(\mathbf{r}) = A_{nd}\Phi_{SB}(z)\rho^2 e^{\pm 2i\varphi}P_{n-3}(u)e^{-(\kappa_{nd}u+\eta_{nd}\rho^2)}, \quad (2.62)$$

O cálculo variacional se procede como no caso anterior, com a diferença de que agora, em virtude das gaussianas, devemos realizar uma integração numérica. Os cálculos computacionais foram feitos nos computadores VAX 680 e VAX 7330 do IFUSP, sendo usada a biblioteca de subrotinas do IMSL. Apresentamos na figura (2.13) os níveis de energia de nosso sistema para um poço de largura  $L = 1a^*$  e campo magnético dado por  $\gamma = 3,0$ . Para o GaAs

$$B = 3,3\gamma \text{ tesla} . \quad (2.63)$$

Nesta figura mostramos apenas os níveis com  $m_s = -1/2$ , pois esperamos que, a baixas temperaturas, os elétrons estarão todos no estado  $|1s, -1/2\rangle$  e, quando excitados por absorção de fótons, manterão o número quântico de spin, de modo que não estaremos interessados nos níveis  $|1s, 1/2\rangle$ . Para obtermos estes outros níveis basta somarmos  $\gamma$  a todos eles, como podemos verificar a partir do hamiltoniano do sistema.

Convém observar que os estados, cujas energias foram calculadas, são aqueles que se mantém em um confinamento bidimensional. Dessa forma foram excluídos os estados do tipo  $np_0$ ,  $nd_0$  e  $nd_{\pm}$ . À medida que o poço vai alargando-se, estes estados vão tornando-se cada vez mais importantes. Se considerarmos uma impureza central, teremos novos estados ortogonais aos já existentes, o que não é verdade para uma impureza localizada fora do centro. Teríamos então que estabelecer novas condições de ortogonalidade e, conseqüentemente, modificar as funções de onda ora usadas. Portanto não devemos, com o formalismo até aqui desenvolvido, estudar poços largos.

Vamos analisar agora a forma das funções de onda. As superfícies nodais geradas por  $P_n(u)$  e determinadas pela equação

$$P_n(u) = 0 \quad (2.64)$$

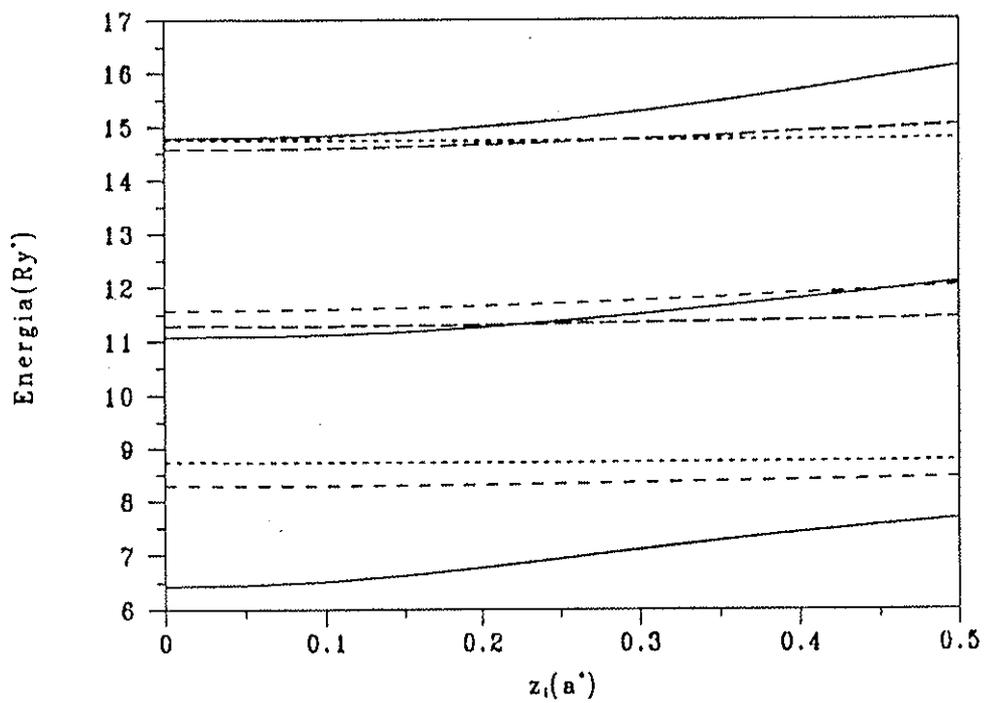


Figura 2.13: *Energias de um poço quântico de largura  $L = 1a^*$  e  $\gamma = 3,0$ . Considera-se estados com número quântico de spin =  $-1/2$ .*  
 Linhas contínuas — estados  $1s$ ,  $2s$  e  $3s$ .  
 Linhas tracejadas — traços pequenos — estados  $2p_-$  e  $2p_+$ .  
 Linhas tracejadas — traços grandes — estados  $3p_-$  e  $3p_+$ .  
 Linhas pontilhadas — estados  $3d_{-2}$  e  $3d_{+2}$ .

Tabela 2.4: Raios das superfícies nodais do estado 3s, para uma impureza central em um poço quântico de  $1a^*$ , variando-se o campo magnético.

Raios nodais em unidades efetivas.

$\gamma$	0,0	1,0	2,0	3,0
Nodo 1	1,11	0,88	0,74	0,66
Nodo 2	5,42	2,92	2,26	1,93

representam superfícies esféricas centradas na impureza . Em virtude dos limites do poço quântico teremos partes destas superfícies por círculos localizados nas paredes do poço . Assim, para poços largos ou campos magnéticos intensos, poderemos ter superfícies nodais completamente esféricas, caracterizando um não confinamento pelo poço quântico . Diminuindo-se o campo magnético ou afinando-se o poço as superfícies tenderão a tornar-se setores de esferas, aproximando-se do que se espera de um átomo hidrogenóide confinado em duas dimensões. A figura (2.14) nos mostra as superfícies nodais para uma impureza central em situações diferentes. A tabela (2.4) nos mostra os raios das superfícies nodais do nível 3s para vários valores de campo magnético aplicado.

Para finalizar este capítulo vamos estudar a densidade de estados para um poço quântico dopado uniformemente com impurezas doadoras. A densidade de estados por impureza é obtida através da contribuição de cada impureza doadora, ou seja:

$$D(E) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(E - \epsilon_i) , \quad (2.65)$$

sendo  $N$  o número total de doadores e  $\epsilon_i$  a energia fundamental da  $i$ -ésima impureza . Sendo  $\epsilon_i$  função da posição  $z_i$  da impureza , temos:

$$D(E) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(E - \epsilon(z_i)) . \quad (2.66)$$

Como as impurezas são substitucionais, teremos  $z_i$  como sendo as posições das camadas atômicas do material hospedeiro. Para poços quânticos não

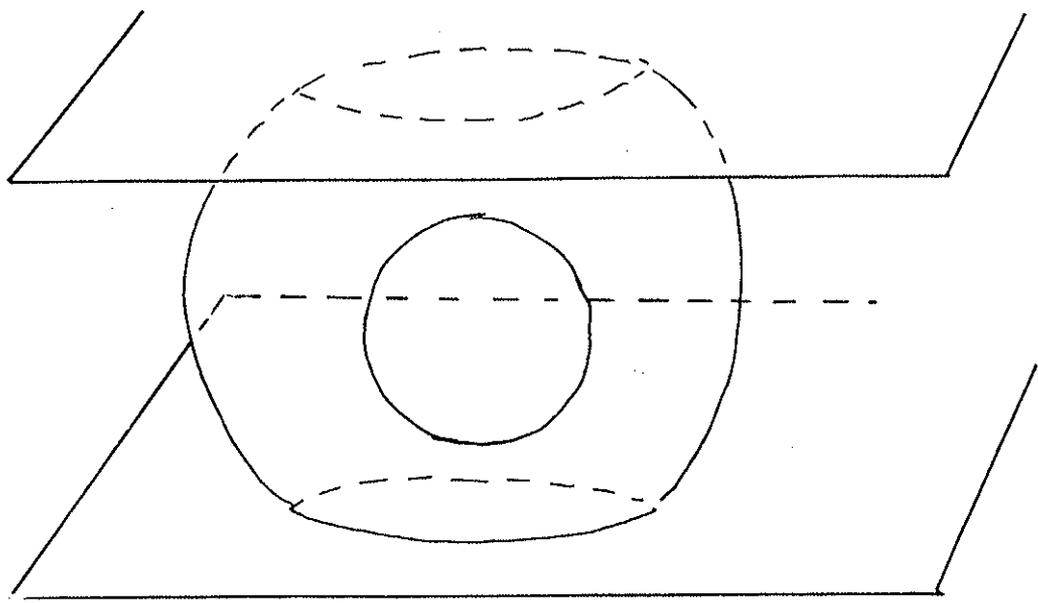


Figura 2.14: *Superfícies nodais de uma impureza central.*

muito estreitos podemos tomar o limite de  $z_i$  contínuo. Neste caso, aplicando-se a seguinte propriedade da função delta de Dirac:

$$\delta(f(x) - f_0) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{df}{dx} \right|_{f(x_i)=f_0}} \quad (2.67)$$

onde  $f_0$  é o valor de  $f(x)$  no ponto  $x_i$ , obtemos

$$D(E) = \int_{-L/2}^{L/2} P(z) \sum_j \frac{\delta(z - \zeta_j)}{\left| \frac{d\epsilon}{dz} \right|_{\epsilon(\zeta_j)=E}} dz, \quad (2.68)$$

onde  $P(z)$  é o perfil de dopagem normalizado, ou seja:

$$\int_{-L/2}^{L/2} P(z) dz = 1. \quad (2.69)$$

Tomando-se uma distribuição uniforme de impurezas doadoras, temos

$$P(z) = \frac{1}{L}. \quad (2.70)$$

Dessa forma a densidade de estados fica sendo

$$D(E) = \frac{2}{L} \frac{1}{\left| \frac{d\epsilon}{dz} \right|_{\epsilon(z)=E}}. \quad (2.71)$$

Na figura (2.15) mostramos as densidades de estados para um poço de largura igual a  $1a^*$ , para  $\gamma = 0,0$  e  $\gamma = 3,0$ . Podemos notar que a forma da densidade não se altera, sendo igual à calculada por Bastard [Ba 81]. Elas apresentam dois picos correspondentes a energias de impurezas centrais e periféricas. Com a aplicação do campo magnético o efeito maior é o alargamento de banda. Outro efeito importante é a atenuação do pico correspondente a impurezas localizadas nas paredes dos poços.

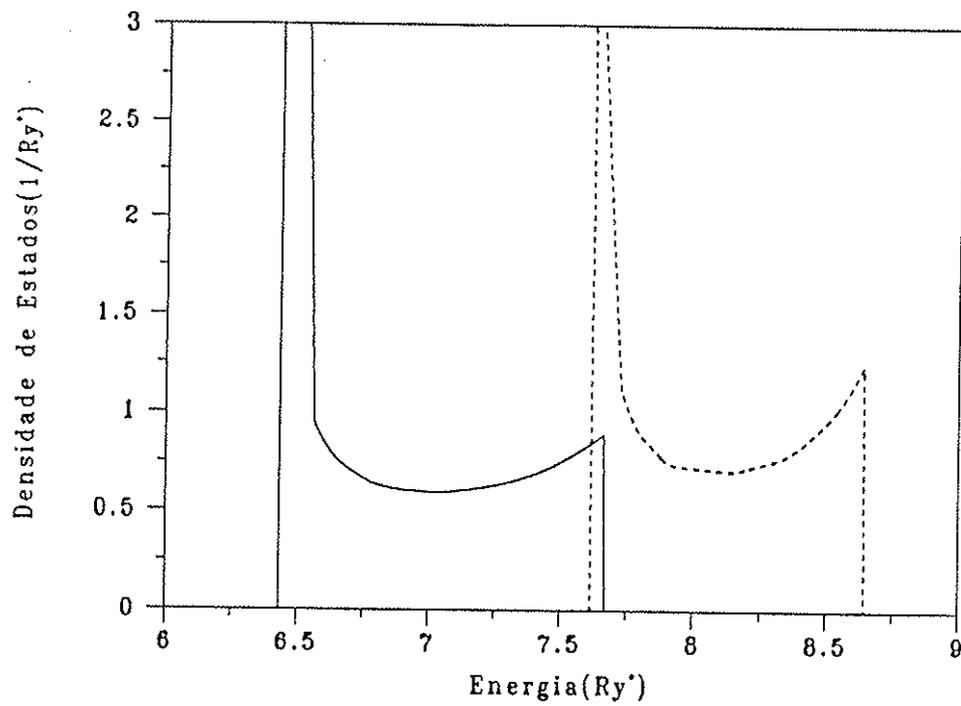


Figura 2.15: Densidades de estados para um poço quântico dopado levemente com doadores, com e sem campo magnético aplicado.

Poço quântico de largura  $1a^*$ .

Linha tracejada -  $\gamma = 0,0$ .

Linha contínua -  $\gamma = 3,0$

## Capítulo 3

# Absorção de fótons por doadores em poços quânticos

Neste capítulo estudaremos a absorção de fótons por um poço quântico levemente dopado com doadores rasos. Sendo baixa a concentração de dopantes, os doadores estarão muito separados uns dos outros e portanto a superposição das funções de onda dos elétrons ligados a doadores será desprezível (vide apêndice E). Por tal motivo as transições serão do tipo intra-sítio, isto é, ocorrerão entre dois níveis pertencentes à mesma impureza doadora. Devido às características do sistema, tais como massa efetiva pequena em relação à massa do elétron livre ( $m^* = 0,067m_0$ , para o GaAs), e constante dielétrica grande em relação ao vácuo ( $\kappa = 13,1$  para o GaAs), teremos energias de transição que se situam na faixa do infravermelho longínquo. Shanabrook et al [Ja 85,Sh 87] nos apresentam medidas de absorção nesta faixa de frequência.

O estudo teórico da absorção é feito através da parte real da condutividade ótica ( $\sigma_1(\omega)$ ),

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) - i\sigma_2(\omega). \quad (3.1)$$

$\sigma(\omega)$  relaciona os vetores densidade de corrente e campo elétrico, estabelecendo, além da razão dos módulos, a defasagem entre ambos.

Sendo

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} + c.c. \quad (3.2)$$

temos

$$\mathbf{J} = \sigma(\omega)\mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} + c.c. \quad (3.3)$$

A potência de dissipação de energia eletromagnética é dada pela média temporal

$$\mathcal{P} = \langle \mathcal{E} \cdot \mathbf{J} \rangle \quad (3.4)$$

$$= \sigma_1(\omega) \langle \mathcal{E}^2 \rangle . \quad (3.5)$$

A obtenção de  $\sigma_1(\omega)$  é feita estudando-se a interação entre a radiação eletromagnética e um doador neutro situado em um poço quântico . Aplicando-se a Regra de Ouro de Fermi a este sistema obtem-se a taxa de transição por unidade de tempo ( $W$ ) entre os níveis envolvidos no processo de absorção . Igualando-se a potência dissipada pelo fóton (3.5) à potência absorvida pelo doador ( $W \times \hbar\omega$ ) obtemos  $\sigma_1(\omega)$ :

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\hbar\omega W}{\langle \mathcal{E}^2 \rangle} \quad (3.6)$$

Suponhamos que um doador, localizado em  $z_i$ , vá absorver um fóton de frequência  $\omega$ , polarização  $\mathbf{u}$  e vetor de onda  $k$ , perpendicular às paredes do poço quântico , conforme ilustra a figura (3.1). O hamiltoniano de um doador neutro na presença de um campo magnético externo, é dado pela expressão (2.53). Nele temos um potencial vetor que gera o campo magnético estático. Vamos representar este potencial por  $A_{est}(\mathbf{r})$  e definir:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}_{est}(\mathbf{r})}{c} , \quad (3.7)$$

de modo que tenhamos:

$$H(z_i) = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} - \frac{e^2}{Ku} + V(z) + m_s \hbar \frac{eB}{m^*c} . \quad (3.8)$$

A interação deste sistema com a radiação eletromagnética é obtida fazendo-se a substituição

$$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P} + \frac{e\mathbf{A}_{rad}(\mathbf{r}, t)}{c} , \quad (3.9)$$

onde  $\mathbf{A}_{rad}(\mathbf{r}, t)$  é o potencial vetor da radiação infravermelha, sendo dado por

$$\mathbf{A}_{rad}(\mathbf{r}, t) = \frac{A_0 \mathbf{u}}{\sqrt{2}} \exp \{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\} + c.c. , \quad (3.10)$$

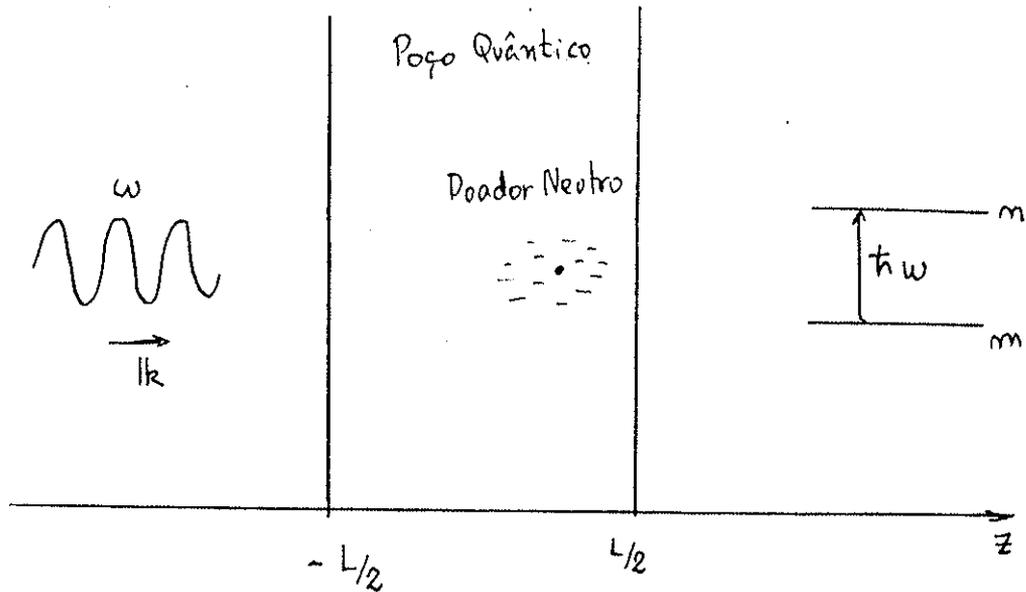


Figura 3.1: Absorção de um fóton por um doador em um poço quântico .

mais o termo de interação do momento magnético de spin do elétron com o campo magnético da radiação incidente:

$$\frac{e}{m^*c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (3.11)$$

sendo  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  dado por:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}_{rad}(\mathbf{r}, t) \quad (3.12)$$

$$= i\hat{z} \times \mathbf{u} \frac{B_0}{\sqrt{2}} \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\} + c.c., \quad (3.13)$$

com

$$B_0 = kA_0. \quad (3.14)$$

O campo elétrico da radiação fica sendo

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_{rad}}{\partial t} \quad (3.15)$$

$$= \frac{iE_0 \mathbf{u}}{\sqrt{2}} \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\} + c.c. \quad (3.16)$$

com

$$E_0 = \frac{\omega A_0}{c} . \quad (3.17)$$

A polarização  $\mathbf{u}$  pode ser linear

$$\mathbf{u} = \hat{x} \cos \lambda + \hat{y} \sin \lambda , \quad (3.18)$$

com  $\lambda$  sendo o ângulo que ela faz com o eixo  $x$ , segundo o sentido anti-horário, ou circular

$$\mathbf{u} = \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}} \quad (3.19)$$

à esquerda (+) ou à direita (-).

O fator  $\sqrt{2}^{-1}$  foi introduzido nas expressões de  $\mathbf{A}$  e  $\mathcal{E}$  por conveniência. Dessa forma as médias temporais dos quadrados do potencial vetor e campo elétrico ficam sendo:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}^2 \rangle &= \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{A}^2 dt \\ &= A_0^2 , \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{E}^2 \rangle &= \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{E}^2 dt \\ &= E_0^2 , \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde  $T$  é o período da onda.

O novo hamiltoniano pode então ser escrito como

$$\mathcal{H}(z_i) = H(z_i) + H_{er} \quad (3.22)$$

com

$$H_{er} = \frac{e}{2m^*c} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_{rad} + \mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P}) + \frac{e}{m^*c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{2m^*c^2} \mathbf{A}_{rad}^2 . \quad (3.23)$$

Uma vez que

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_{rad}(\mathbf{r}, t) = 0 , \quad (3.24)$$

temos

$$H_{er} = \frac{e}{m^*c} \mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P} + \frac{e}{m^*c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{2m^*c^2} \mathbf{A}_{rad}^2 . \quad (3.25)$$

Observando os termos da expressão (3.25) vemos que os dois primeiros são lineares em  $A_0$ , enquanto que o terceiro é quadrático. Como as fontes usuais de radiação têm intensidade suficientemente baixa, desprezamos o efeito do último termo em comparação com os lineares. Dos dois termos restantes, o efeito do segundo é muito menor que o do primeiro. Isto pode ser visto, calculando-se os valores esperados de ambos para o estado fundamental do sistema e, a seguir obtendo a razão entre ambos.

$$\frac{\langle (e/m^*c)\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \rangle}{\langle (e/m^*c)\mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P} \rangle} \sim \frac{\hbar k}{\bar{p}} \quad (3.26)$$

$$\sim \frac{a^*}{\lambda} . \quad (3.27)$$

Mas

$$\frac{a^*}{\lambda} \ll 1 , \quad (3.28)$$

pois o comprimento de onda da radiação do infravermelho distante é da ordem de  $10^6 \text{Å}$ , enquanto o raio de Bohr ( $a^*$ ) do sistema é aproximadamente  $100 \text{Å}$ . Portanto a perturbação no sistema, causada pela radiação infravermelha incidente pode ser aproximada por

$$H_{er} = \frac{e}{m^*c} \mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P} , \quad (3.29)$$

Aplicando-se a Regra de Ouro de Fermi a este sistema obtemos:

$$W(z_i, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \frac{e}{m^*c} \mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P} | m \rangle|^2 \delta(\Delta E_{nm}(z_i) - \hbar\omega) \quad (3.30)$$

onde  $W(z_i, \omega)$  é a taxa de transição por unidade de tempo e

$$\Delta E_{nm}(z_i) = E_n(z_i) - E_m(z_i) \quad (3.31)$$

é a diferença de energia entre os níveis  $m$  e  $n$ , inicial e final respectivamente.

Para calcularmos o elemento de matriz da expressão (3.30) faremos uso da aproximação de comprimento de onda longo, ou seja:

$$\exp\{ik \cdot \mathbf{r}\} \sim 1 . \quad (3.32)$$

Isto se justifica uma vez que o comprimento de onda da radiação infravermelha distante é muito maior que o raio de Bohr do sistema.

Substituindo-se  $\mathbf{A}_{rad}$ , da expressão (3.10) no elemento de matriz  $\langle n|\mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P}|m\rangle$  e fazendo-se a aproximação de comprimento de onda longo temos

$$\langle n|\mathbf{A}_{rad} \cdot \mathbf{P}|m\rangle = \frac{A_0 e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}} \mathbf{u} \cdot \langle n|\mathbf{P}|m\rangle . \quad (3.33)$$

Como o hamiltoniano do sistema é do tipo

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) , \quad (3.34)$$

temos que

$$[x_i, H] = \frac{i\hbar}{m^*} P_i . \quad (3.35)$$

Portanto

$$\langle n|\mathbf{P}|m\rangle = \frac{m^*}{i\hbar} \langle n|\mathbf{r}H - H\mathbf{r}|m\rangle \quad (3.36)$$

$$= \frac{im^*}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n|\mathbf{r}|m\rangle . \quad (3.37)$$

Substituindo-se as expressões (3.17), (3.31), (3.33) e (3.37) em (3.30), obtemos:

$$W(z_i, \omega) = \frac{\pi e^2 E_0^2}{\hbar} |\langle n|\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}|m\rangle|^2 \delta(\Delta E_{nm}(z_i) - \hbar\omega) \quad (3.38)$$

Nesta última expressão foi usada a propriedade das funções delta

$$\Delta E_{nm}(z_i) \delta(\Delta E_{nm}(z_i) - \hbar\omega) = \hbar\omega \delta(\Delta E_{nm}(z_i) - \hbar\omega) . \quad (3.39)$$

Finalmente, substituindo (3.21) e (3.38) em (3.6) obtemos:

$$\sigma_1(z_i, \omega) = \pi e^2 \omega |\mathbf{u} \cdot \langle n|\mathbf{r}|m\rangle|^2 \delta(\Delta E_{nm}(z_i) - \hbar\omega) , \quad (3.40)$$

que é o coeficiente de absorção para uma única impureza em em poço quântico

Para se obter  $\sigma_1(\omega)$ , que é o coeficiente de absorção para uma distribuição de impurezas, precisamos somar as contribuições de todas as impurezas do

poço quântico . Dado um perfil de distribuição de impurezas  $P(z_i)$  obtemos

$$\sigma_1(\omega) = \int_{-L/2}^{L/2} P(z_i) \sigma_1(z_i, \omega) dz_i . \quad (3.41)$$

Novamente usando-se a propriedade (2.67) das funções delta na expressão (3.40), obtemos

$$\sigma_1(\omega) = \pi e^2 \omega \sum_l \frac{P(z_l) |\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2}{\left| \frac{d\Delta E_{nm}(z_l)}{dz_l} \right|_{\Delta E_{nm}(z_l) = \hbar\omega}} \quad (3.42)$$

Chamando-se

$$T_{nm}(\Delta E_{nm}(z_i)) = \pi e^2 \omega |\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \quad (3.43)$$

e uma vez que  $\Delta E_{nm}(z_i)$  é uma função par de  $z_i$  e monotônica, nos intervalos  $[-L/2, 0]$  e  $[0, L/2]$ , podemos fatorar  $\sigma_1(\omega)$ , assim obtendo

$$\sigma_1(\omega) = D_{nm}(\hbar\omega) T_{nm}(\hbar\omega) \quad (3.44)$$

onde  $D_{nm}(\hbar\omega)$  é a densidade adjunta de estados para os ramos  $n$  e  $m$ , ou seja:

$$D_{nm}(\hbar\omega) = \sum_l \frac{P(z_l)}{\left| \frac{d\Delta E_{nm}(z_l)}{dz_l} \right|_{\Delta E_{nm}(z_l) = \hbar\omega}} \quad (3.45)$$

A expressão (3.44) nos mostra que  $\sigma_1(\omega)$  é obtida ponderando-se a densidade adjunta de estados pela força de osciladores da transição (*oscillator strength*) .

Antes de analisarmos os coeficientes de absorção devidos a varias distribuições  $P(z_i)$ , vamos analisar as regras de seleção do operador (3.29). Sejam  $\ell_m$  e  $\ell_n$  os números quânticos azimutais relativos aos estados  $m$  e  $n$ . Se a radiação infravermelha tiver polarização plana teremos:

$$\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle = \langle n | \rho \cos(\varphi - \lambda) | m \rangle \quad (3.46)$$

$$= \frac{1}{2} \langle n | \rho [e^{i(\varphi - \lambda)} + e^{-i(\varphi - \lambda)}] | m \rangle \quad (3.47)$$

$$= \alpha \int_0^{2\pi} \left[ e^{i(\ell_m - \ell_n + 1)\varphi} e^{-i\lambda} + e^{i(\ell_m - \ell_n - 1)\varphi} e^{i\lambda} \right] d\varphi \quad (3.48)$$

$$= 2\pi\alpha \left[ \delta_{\ell_m - \ell_n + 1} e^{-i\lambda} + \delta_{\ell_m - \ell_n - 1} e^{i\lambda} \right] \quad (3.49)$$

Logo a condição para que haja a transição é

$$\ell_m - \ell_n = \pm 1 \quad (3.50)$$

Para a polarização circular temos

$$\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle n | \rho e^{\pm i\varphi} | m \rangle \quad (3.51)$$

$$= \beta \int_0^{2\pi} e^{i(\ell_m - \ell_n \pm 1)\varphi} d\varphi \quad (3.52)$$

$$= 2\pi\beta \delta_{\ell_m - \ell_n \pm 1} \quad (3.53)$$

O duplo sinal na equação acima refere-se às polarizações à esquerda e à direita respectivamente.

Com relação ao estado de spin da impureza doadora, como o hamiltoniano de interação (3.29) não contém termos de spin podemos dizer que há conservação do número quântico de spin ( $m_s$ ).

Para um processo de absorção, partindo-se do estado fundamental ( $1s$ ), poderemos ter uma mistura de estados finais, por exemplo  $2p_{\pm}$ , quando a polarização for linear, ou apenas um destes estados, caso a polarização seja circular. Com um campo magnético nulo, os estados finais serão degenerados. Observando as expressões (3.52) e (3.48), temos que:

$$\frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2} = 2, \quad (3.54)$$

de modo que, se somarmos as contribuições das duas transições possíveis para a polarização linear obteremos o resultado devido apenas a uma das polarizações circulares. Por isso, neste caso, é indiferente a escolha da polarização da radiação incidente.

Para o caso de um campo magnético não nulo, as energias de transição serão diferentes, podendo ser improvável um dos tipos de transição efetuadas

através de radiação de polarização plana. Neste caso a absorção de radiação plana é diferente da de polarização circular. Por este motivo estaremos usando neste trabalho a polarização circular e automaticamente estaremos explicitando o estado final da impureza doadora.

Vamos analisar neste trabalho as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  e  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ . Os exemplos a seguir são tomados com campo magnético nulo. A aplicação de um campo magnético distorceria um pouco as funções de onda e alteraria as energias de transição, deixando as formas dos coeficientes de absorção praticamente com o mesmo formato. Primeiramente tomemos a distribuição uniforme

$$P_U(z_i) = \frac{1}{L}. \quad (3.55)$$

Vemos na figura (3.2) que os coeficientes de absorção para os dois tipos de transição apresentam dois picos. O mais acentuado, da direita, corresponde a transições que ocorrem em impurezas situadas no centro do poço. Ele é uma consequência da singularidade que há na densidade adjunta de estados para as energias envolvidas nas transições acima citadas. O pico secundário provém de impurezas situadas nas bordas do poço quântico. Convém notar a diferença em escala entre as duas transições. A absorção se dá de modo mais eficaz nas transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$ .

Outros tipos de dopagem, que iremos estudar, são a gaussiana  $P_G(z_i)$  e a do tipo delta  $P_{\delta}(z_i)$ . tomando-se distribuições centradas em  $z_m$  e com largura  $d$ , obtemos

$$P_G(z_i) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}d} \exp\left(-\frac{2(z_i - z_m)^2}{d^2}\right), \quad (3.56)$$

e

$$P_{\delta}(z_i) = \begin{cases} 1/d, & \text{se } z_m - d/2 < z_i < z_m + d/2; \\ 0, & \text{outros casos} \end{cases} \quad (3.57)$$

Analisando o efeito destas duas dopagens para a transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  verificamos na figura (3.3) que  $\sigma_1(\omega)$ , para a dopagem tipo delta, apresenta a forma de um pedaço de  $\sigma_1(\omega)$  devido à distribuição uniforme. Já a dopagem gaussiana apresenta um coeficiente de absorção com estrutura gaussiana.

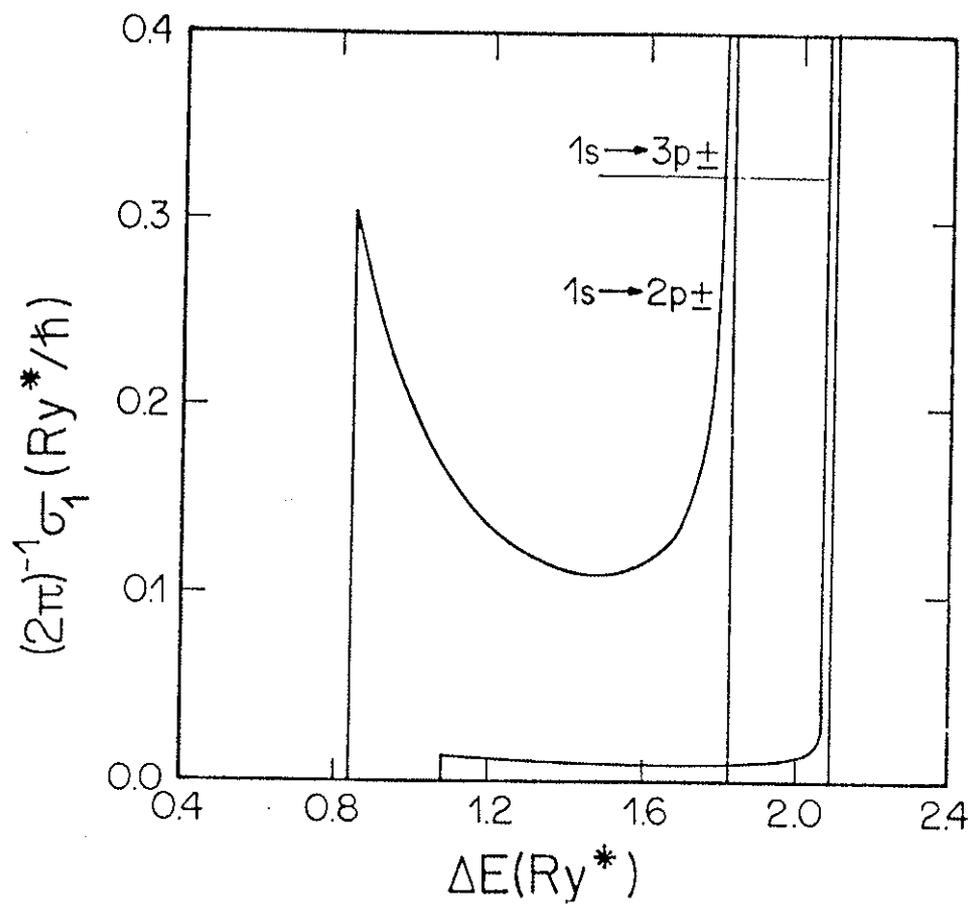


Figura 3.2: Coeficientes de absorção para as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}, 3p_{\pm}$ , na ausência de campo magnético aplicado e com dopagem uniforme de doadores.

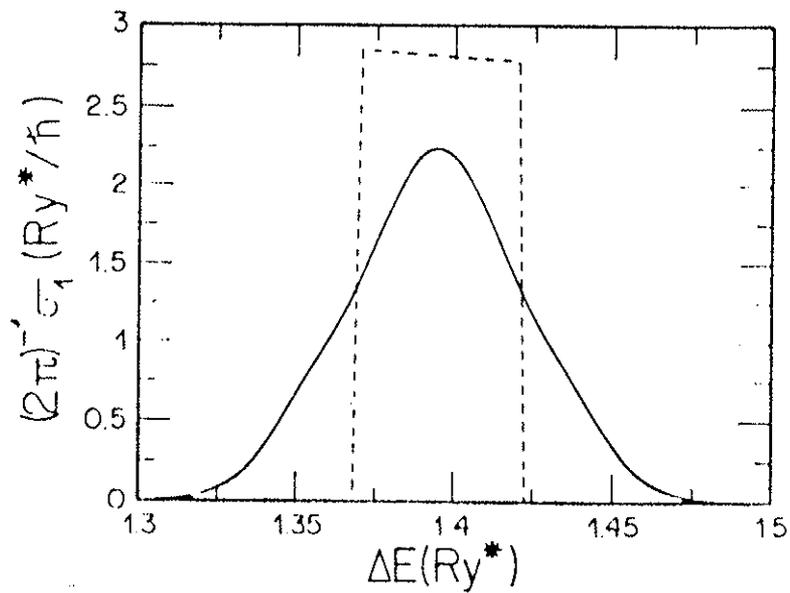


Figura 3.3: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  com campo magnético nulo e distribuições gaussianas e do tipo delta.

Distribuição gaussiana — linha contínua

Distribuição tipo delta — linha tracejada

Ambas as distribuições com  $d = 0,02a^*$  e  $z_m = 0,25a^*$ .

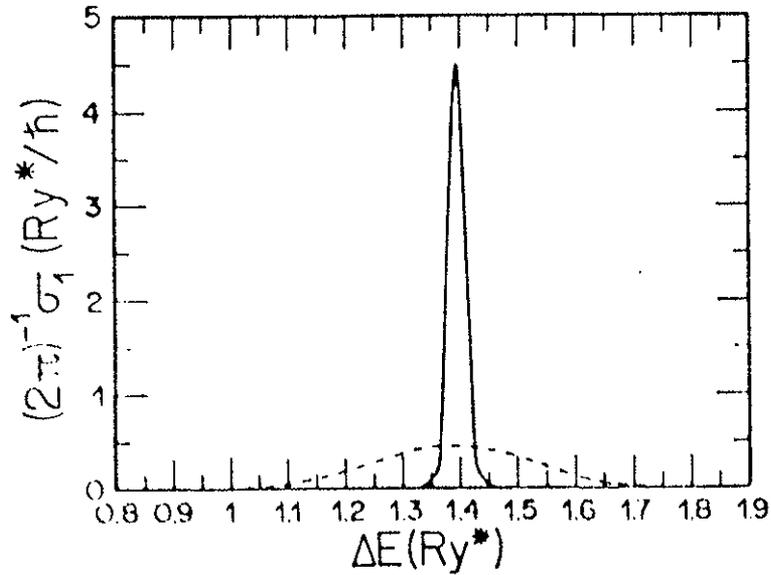


Figura 3.4: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  com campo magnético nulo e duas distribuições gaussianas de larguras diferentes.

Linha contínua —  $d = 0,1a^*$  e  $z_m = 0,25a^*$ .

Linha tracejada —  $d = 0,01a^*$  e  $z_m = 0,25a^*$ .

Na figura (3.4) são mostrados os coeficientes de absorção para duas dopagens gaussianas de larguras diferentes, mas centradas no mesmo ponto. Podemos verificar o aparecimento de um pico à medida que a dopagem fica mais fina. O mesmo se sucede com a dopagem tipo delta.

## Capítulo 4

# O poço quântico dopado e compensado. Simulação Monte Carlo

Neste capítulo vamos calcular a configuração e a energia do estado fundamental de um poço quântico dopado e compensado com impurezas rasas. Vamos considerar  $N_D$  a densidade de doadores (neste trabalho consideradas as impurezas majoritárias) e  $N_A$  a densidade de aceitadores. A razão entre  $N_D$  e  $N_A$  é chamada de compensação

$$k = \frac{N_A}{N_D}, \quad (4.1)$$

vemos portanto que

$$0 \leq k \leq 1. \quad (4.2)$$

Como segunda hipótese, trabalharemos com baixas temperaturas. Neste caso podemos desprezar a ativação térmica de elétrons para os estados excitados e conseqüentemente para a primeira sub-banda de condução e a formação de centros doadores negativamente carregados (centros  $D^-$ ). Teremos então todos os aceitadores ionizados negativamente (centros  $A^-$ ), um igual número de doadores ionizados positivamente (centros  $D^+$ ) e o restante dos doadores neutros (centros  $D^0$ ).

Os centros acima mencionados estão localizados aleatoriamente. A energia do sistema é calculada como a soma das energias de interação eletrostática entre eles, mais a energia dos elétrons ligados a doadores, formando

centros  $D^\circ$ . Nosso problema, então é calcular a influência das impurezas ionizadas sobre as energias dos estados fundamentais ( $1s$ ) dos elétrons ligados a doadores.

Como última hipótese, vamos considerar uma concentração de doadores muito baixa, da ordem de  $10^{+16} \text{cm}^{-3}$ . Isto significa que a distância média entre impurezas é muito maior que o raio médio ( $a$ ) de um elétron ligado a uma impureza, ou seja:

$$\bar{N}_D^{1/3} \gg a \quad (4.3)$$

ou

$$N_D a^3 \ll 1 \quad (4.4)$$

Neste caso a energia de polarização do estado  $1s$  que é da ordem de

$$\frac{e^2 N_D^{4/3} a^3}{K} \quad (4.5)$$

é desprezível face à interação de ordem zero, vide (B.14), que é da ordem de

$$\frac{e^2 N_D^{1/3}}{K}. \quad (4.6)$$

A superposição das funções de onda de impurezas vizinhas é da ordem de

$$\exp[-(N_D^{1/3} a)^{-1}], \quad (4.7)$$

que, em virtude da restrição (4.4), pode ser negligenciada. Estes cálculos são vistos no apêndice (E). Podemos desprezar também a interação spin-spin para elétrons localizados em doadores adjacentes se a condição (4.4) for válida.

Como estamos a baixas temperaturas, deveremos ter cada impureza neutra no estado fundamental. Isto significa que o elétron ligado à impureza estará no estado  $1s$ . Se o campo magnético for nulo poderemos ter qualquer estado de spin. Porém, na presença de um campo magnético teremos os momentos magnéticos de spin orientados paralelamente ao campo ou, em outras palavras, os elétrons deverão ter spins antiparalelos ao campo. Como temos o campo orientado segundo o eixo  $z$ , vide capítulo (2), teremos os elétrons com  $m_s = -1/2$ .

Seja  $n_i$  o número de ocupação da  $i$ -ésima impureza doadora. Temos portanto  $n_i = 0$ , representando um centro  $D^+$ , e  $n_i = 1$ , para os centros  $D^\circ$ .

Consideremos inicialmente a energia de interação entre doadores ionizados ( $E_{D^+D^+}$ ):

$$E_{D^+D^+} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{K} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{(1-n_i)(1-n_j)}{r_{ij}}, \quad (4.8)$$

onde

$$r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \quad (4.9)$$

é a distância entre o  $i$ -ésimo e o  $j$ -ésimo doadores. O fator  $1/2$  aparece para então contarmos em dobro as interações eletrostáticas. O produto  $(1-n_i)(1-n_j)$  caracteriza o estado de ionização de ambos doadores.

A energia de interação entre aceitadores (todos ionizados) ( $E_{A^-A^-}$ ) é dada por:

$$E_{A^-A^-} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{K} \sum_{\substack{\nu,\gamma \\ \nu \neq \gamma}} \frac{1}{r_{\nu\gamma}} \quad (4.10)$$

onde os índices gregos representam aceitadores.

A seguir a interação entre doadores e aceitadores ionizados ( $E_{D^+A^-}$ ):

$$E_{D^+A^-} = -\frac{e^2}{K} \sum_{i,\nu} \frac{(1-n_i)}{r_{i\nu}} \quad (4.11)$$

A interação eletrostática que está faltando é a de doadores neutros com o restante das impurezas ionizadas. Da hipótese de baixa densidade de doadores, aproximamos o potencial das impurezas ionizadas com um potencial constante, igual ao existente sobre o caroço de cada impureza neutra, conforme eq. (B.14). Dessa forma o elétron e o caroço da impureza sentem o mesmo potencial e portanto a contribuição energética desta interação será nula. Resta-nos finalmente a energia devido à ligação dos elétrons às impurezas ( $E_{D^+e^-}$ ), tornando-as neutras.

$$E_{D^+e^-} = \sum_i n_i \varepsilon_i \quad (4.12)$$

onde  $\varepsilon_i$  é a energia do elétron ligado à  $i$ -ésima impureza. Essa energia depende da localização da impureza dentro do poço.

A energia total é dada portanto por

$$E_S = E_{D^+D^+} + E_{A^-A^-} + E_{D^+A^-} + E_{D^+e^-} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^2}{K} \left( \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{1}{2} \frac{(1-n_i)(1-n_j)}{r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu,\gamma \\ \nu \neq \gamma}} \frac{1}{r_{\nu\gamma}} - \sum_{i,\nu} \frac{(1-n_i)}{r_{i\nu}} \right) \\
&\quad + \sum_i n_i \epsilon_i. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Neste modelo temos interações eletrostáticas entre cargas puntiformes, cálculos estes efetuados classicamente, e confinamento de elétrons ligados a impurezas, em um poço quântico cujos resultados são obtidos quanticamente. Por esta razão chamamos este modelo de Modelo Semiclássico de Banda de Impureza (MSBI), desenvolvido por Andrada e Silva & Cunha Lima [Si 89].

Para o caso de um poço quântico muito largo, o sistema se aproxima de semicondutor dopado e compensado e as energias  $\epsilon_i$  tornam-se independentes da posição. Então o termo  $E_{D^+e^-}$  torna-se

$$E_{D^+e^-} = \epsilon \sum_i n_i \tag{4.15}$$

onde  $\epsilon$  é a energia de um elétron ligado a uma impureza doadora. Sendo constante, este termo pode ser eliminado, redefinindo-se o zero de energia e  $E_S$  passa a conter apenas contribuições eletrostáticas de cargas puntiformes. Neste caso temos o Modelo Clássico de Banda de Impureza (MCBI).

Voltando ao MSBI temos que a energia de uma elétron ligado à  $i$ -ésima impureza  $\epsilon_i$  é dado por:

$$\epsilon_i = E_S(n_1, n_2, \dots, n_i = 1, \dots) - E_S(n_1, n_2, \dots, n_i = 0, \dots) \tag{4.16}$$

$$= \epsilon_i + \frac{e^2}{K} \left( \sum_{\nu} \frac{1}{r_{i\nu}} - \sum_{j \neq i} \frac{(1-n_j)}{r_{ij}} \right). \tag{4.17}$$

O estado fundamental do sistema é obtido minimizando-se  $E_S$  (4.14) em relação ao conjunto de números de ocupação  $\{n_i\}$ , sujeito à condição

$$\sum_i n_i = N \tag{4.18}$$

onde  $N$  é o número total de elétrons do sistema, obtido da condição de neutralidade do sistema (número de doadores ionizados igual ao número de aceitadores ionizados) e do volume total do sistema ( $V$ )

$$N = (1 - k)N_D V \tag{4.19}$$

Uma forma alternativa de se achar a energia do estado fundamental é se minimizar

$$\bar{E}_S = E_S - \mu \sum_i n_i \quad (4.20)$$

para um valor fixo do potencial químico  $\mu$ , que é obtido usualmente da condição de neutralidade.

Sendo  $\bar{E}_S$  um mínimo, significa que  $\bar{E}_S$  aumenta para uma variação de um  $n_i$  qualquer. Para que isto ocorra temos que ter:

$$n_i = \begin{cases} 1 & \epsilon_i < \mu \\ 0 & \epsilon_i > \mu \end{cases} \quad (4.21)$$

Para baixas temperaturas, como é o nosso caso temos que  $\mu$  é a energia de Fermi do sistema, separando portanto os níveis ocupados dos vazios.

A aplicabilidade dos modelos MSBI e MCBI se dá para, vide [Ef 85],

$$N_D a^3 \leq 0.002 . \quad (4.22)$$

Para se minimizar a equação (4.14) utilizamos o método de simulação Monte Carlo, através de um algoritmo desenvolvido por Baranovskii et al [Ba 79], que descrevemos a seguir.

Inicialmente geram-se coordenadas aleatórias das impurezas doadoras e aceitadoras. A simulação é feita de modo a distribuir  $\mathcal{N}$  doadores e  $k\mathcal{N}$  aceitadores em um paralelepípedo de base quadrada e de altura  $L$  (largura do poço quântico). A largura  $\ell$  da base é obtida a partir da densidade de doadores, ou seja,

$$N_D = \frac{\mathcal{N}}{L\ell^2} , \quad (4.23)$$

portanto

$$\ell = \sqrt{\frac{\mathcal{N}}{LN_D}} \quad (4.24)$$

$$= \sqrt{\frac{\mathcal{N}}{n_D}} , \quad (4.25)$$

ond  $n_D$  é a densidade superficial de doadores. A equação (4.25) permanece válida para uma dopagem delta. Como exemplo, para uma concentração de

doadores  $N_D = 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , em um poço quântico de largura  $L = 100 \text{Å} = 10^{-6} \text{cm}$ , com  $\mathcal{N} = 800$  posições simuladas, obtemos

$$n_D = 10^{10} \text{cm}^{-2} \quad (4.26)$$

e

$$\ell \approx 2,82 \times 10^4 \text{Å} = 282 \times 10^{-6} \text{cm} \quad (4.27)$$

Num segundo estágio geram-se os números de ocupação dos elétrons. Podemos então calcular os valores de  $E_S$  (4.14) e  $\epsilon_i$  (4.17). De posse dos níveis de energia do sistema, verificamos se  $\epsilon_p$ , o nível ocupado mais elevado, e  $\epsilon_q$ , o nível vazio mais baixo, satisfazem a desigualdade

$$\epsilon_p < \epsilon_q. \quad (4.28)$$

Caso a desigualdade (4.28) não se verifique, trocamos as ocupações destes dois níveis, recalculamos  $E_S$  e  $\{\epsilon_i\}$  e refazemos a comparação. Repetimos este processo até que a comparação (4.28) seja satisfeita. Então o nível de Fermi pode ser calculado como sendo:

$$\mu = \frac{1}{2}(\epsilon_q + \epsilon_p). \quad (4.29)$$

Temos então a seguinte configuração representada na figura (4.1).

A seguir fazemos o teste de mudança de um elétron de um nível ocupado para um vazio. Sejam os níveis  $i$  e  $j$  ocupado e vazio respectivamente, conforme indica a figura (4.2). Efetuando-se a mudança a diferença na energia do sistema será dada por

$$\Delta\epsilon_{ji} = \epsilon_j - \epsilon_i - \frac{e^2}{K r_{ij}} \quad (4.30)$$

A variação da energia do sistema dada pela equação (4.30) é melhor entendida se dividirmos o processo de deslocamento do elétron em duas partes. Primeiramente levamos o elétron da posição da  $i$ -ésima impureza até o infinito, conseqüentemente fazendo variar a energia do sistema de

$$\Delta\epsilon_{\infty i} = -\epsilon_i. \quad (4.31)$$

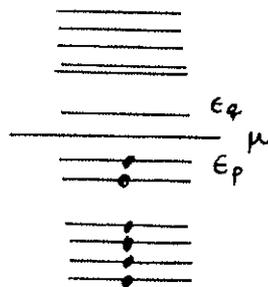


Figura 4.1: Esquema de níveis ocupados e vazios para doadores em um poço quântico dopado e compensado.

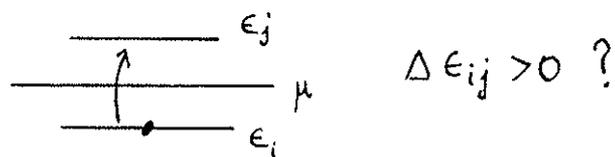


Figura 4.2: Teste da mudança de nível

Depois trazemos o elétron do infinito até a posição da  $j$ -ésima impureza. Neste segundo deslocamento a energia do sistema varia de

$$\Delta\epsilon_{j\infty} = \epsilon_j - \frac{e^2}{Kr_{ij}} \quad (4.32)$$

pois estamos criando um estado ocupado, na presença de mais uma impureza doadora ionizada (a  $i$ -ésima). Somando-se as duas variações de energia obtemos o resultado da equação (4.30).

Se o teste acima indicar

$$\Delta\epsilon_{ji} \leq 0 \quad (4.33)$$

para um par qualquer de impurezas neutra ( $i$ ) e ionizada ( $j$ ), isto significa que não atingimos o mínimo da energia de (4.14) e portanto devemos fazer a troca  $i \longleftrightarrow j$  e repetir o processo a partir do novo conjunto de número  $s$  de ocupação até que, finalmente obtenhamos para quaisquer níveis  $i$  (ocupado) e  $j$  (vazio)

$$\Delta\epsilon_{ji} \geq 0 \quad (4.34)$$

O estado do sistema nestas condições é o que chamamos de pseudo-fundamental. Efros e Shklovskii [Ef 79] mostraram que alterando-se a distribuição inicial de número  $s$  de ocupação e mantendo-se a mesma distribuição de impurezas, pode-se chegar a diferentes estados pseudo-fundamentais, com número  $s$  de ocupação e níveis de energia diferentes, porém a dispersão em energia destes estados é muito pequena.

Neste trabalho calculamos  $\{n_i\}$  e  $\{\epsilon_i\}$  para várias distribuições iniciais de número  $s$  de ocupação. Fazemos os cálculos de uma determinada grandeza para cada minimização e, a seguir, calculamos a média sobre todas as minimizações. Chamamos esta média de média configuracional. Sejam  $N$  minimizações <sup>1</sup> e  $D^{(\alpha)}(E)$  a densidade de estados obtida pela  $\alpha$ -ésima minimização. Temos portanto:

$$\mathcal{D}(E) = \langle D(E) \rangle_{config}. \quad (4.35)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N D^{(\alpha)}(E). \quad (4.36)$$

---

<sup>1</sup>Em nosso trabalho consideramos  $N = 30$  minimizações

Com este método, baseado na simulação Monte Carlo, podemos verificar o efeito da compensação no coeficiente de absorção devido a doadores em poços quânticos. Suponhamos que efetuemos uma dopagem uniforme. Conforme comentamos no início deste capítulo, todos os aceitadores estarão ionizados, enquanto que apenas parte dos doadores o estarão. Pergunta-se então quais os doadores que irão ceder elétrons? A energia do estado  $1s$  das impurezas cresce monotonicamente ao se mudar a posição da impureza do centro para as paredes do poço, portanto devemos esperar que as impurezas próximas à região central permaneçam neutras. Numa primeira aproximação, desprezando-se totalmente a interação eletrostática das impurezas ionizadas com os elétrons, podemos calcular a largura da distribuição de doadores neutros.

Dadas as densidades de carga:

$$\rho_-(z) = -\frac{keN_D}{L} \quad (4.37)$$

e

$$\rho_+(z) = \frac{eN_D}{L} \theta(|z| - \ell), \quad (4.38)$$

respectivamente geradas pelos aceitadores e doadores, podemos calcular  $\ell$  impondo a condição de neutralidade e obtendo

$$\ell = \frac{L}{2}(1 - k). \quad (4.39)$$

Podemos calcular  $\sigma_1(\omega)$ , usando o método do capítulo anterior; considerando o intervalo de energia

$$\Delta E(\ell) < \Delta E < \Delta E(0) \quad (4.40)$$

ao invés de

$$\Delta E(L/2) < \Delta E < \Delta E(0) \quad (4.41)$$

Isto nos conduz a coeficientes de absorção iguais aos anteriormente calculados, sem a parte de menor energia, que foi literalmente cortada.

Com a simulação Monte Carlo, introduzimos a interação eletrostática de ordem zero (B.14) e o resultado é o de se produzir uma cauda na região de baixas energias, correspondentes a absorção por impurezas próximas das fronteiras do poço quântico. As figuras (4.3) e (4.4) nos mostram este efeito,

para as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  e  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  na ausência de campo magnético. Nota-se que, para baixas compensações as duas curvas calculadas de modos diferentes coincidem, sendo mais vantajoso em termos de tempo de cálculo, usar o primeiro método. Como observação poderíamos dizer que a aplicação de um campo magnético alteraria a escala de energia, porém mantendo quase inalterado o formato das curvas.

Outro efeito importante a ser analisado através da simulação Monte Carlo é o alargamento não homogêneo do coeficiente de absorção causado por flutuações no campo elétrico e em seu gradiente, gerados por distribuições de impurezas ionizadas. Até aqui consideramos apenas o efeito de ordem zero (B.14) na interação entre impurezas ionizadas e elétrons. Embora esta interação seja dominante sobre as demais, vide expressões (B.15) a (B.20), devemos levar em conta o efeito das outras, principalmente sobre estados excitados. Isto se justifica na medida em que estes estados apresentam funções de onda menos localizadas e portanto precisamos de informações sobre o potencial eletrostático. Estas informações são dadas através as derivadas primeiras (campo elétrico) e segundas (gradiente do campo elétrico) do potencial.

Uma vez geradas as posições e números de ocupação do sistema, podemos calcular o campo elétrico e seu gradiente na posição de cada doador, utilizando o princípio da superposição. Findo este cálculo e, uma vez conhecidas as funções de onda de vários níveis de cada impureza, calculamos a perturbação para cada impureza individualmente. Esta perturbação é feita em primeira e segunda ordem. Vamos analisar abaixo o efeito de cada termo da expansão do potencial eletrostático.

Seja o elemento de matriz  $V_{p,q}^{(n,m)}$  definido como

$$V_{p,q}^{(n,m)} = \langle p | V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r}) | q \rangle . \quad (4.42)$$

Os estados  $p$  e  $q$  apresentam a componente  $z$  do momento angular orbital dadas respectivamente por  $\ell_p$  e  $\ell_q$ . Assim temos

$$\psi_p(\mathbf{r}) = \phi_p(\rho, z) e^{i\ell_p\varphi} \quad (4.43)$$

e

$$\psi_q(\mathbf{r}) = \phi_q(\rho, z) e^{i\ell_q\varphi} , \quad (4.44)$$

de modo que

$$V_{p,q}^{(n,m)} = \int \rho d\rho dz \phi_p^*(\rho, z) \phi_q(\rho, z) \int V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r}) e^{i(\ell_q - \ell_p)\varphi} d\varphi . \quad (4.45)$$

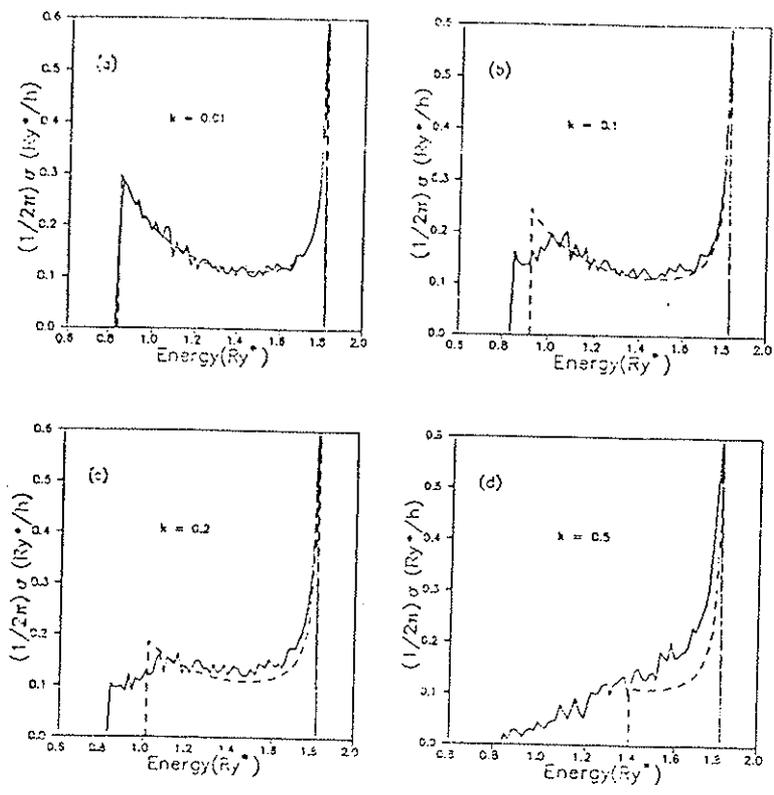


Figura 4.3: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  com  $\gamma = 0$  e vários valores de compensação.

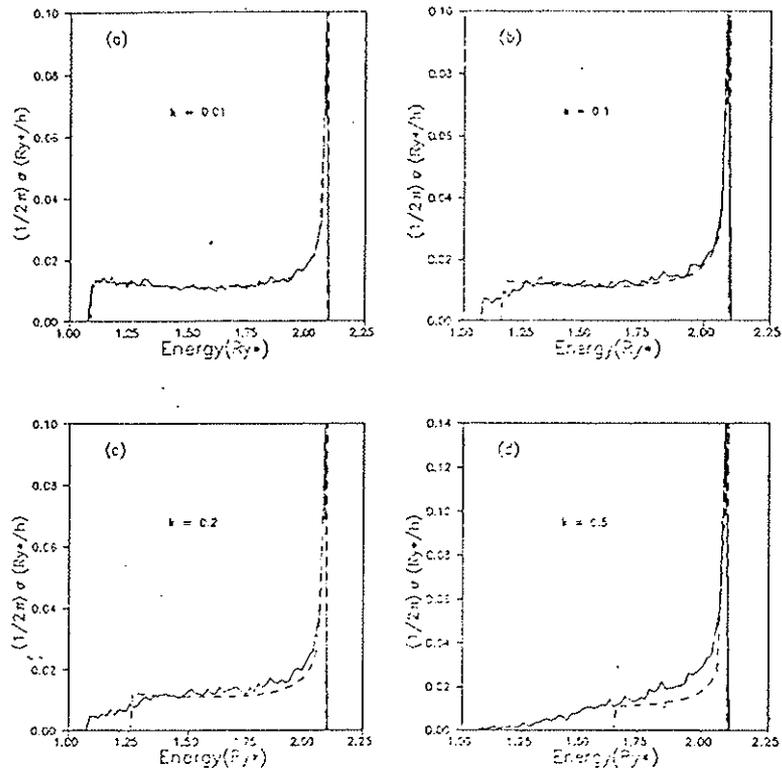


Figura 4.4: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  com  $\gamma = 0$  e vários valores de compensação.

Das expressões (B.14) a (B.17), podemos notar que

$$V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r}) = A^{(n,m)}(\rho, z) \cos m\varphi + B^{(n,m)}(\rho, z) \sin m\varphi, \quad (4.46)$$

portanto

$$V_{p,q}^{(n,m)} = \int \rho d\rho dz \phi_p^*(\rho, z) \phi_q(\rho, z) \left\{ A^{(n,m)}(\rho, z) \int \cos m\varphi e^{i(\ell_q - \ell_p)\varphi} d\varphi + B^{(n,m)}(\rho, z) \int \sin m\varphi e^{i(\ell_q - \ell_p)\varphi} d\varphi \right\} \quad (4.47)$$

$$= 2\pi \int \rho d\rho dz \phi_p^*(\rho, z) \phi_q(\rho, z) \times \left\{ \frac{A^{(n,m)} - iB^{(n,m)}}{2} \delta_{\ell_q - \ell_p - m} + \frac{A^{(n,m)} + iB^{(n,m)}}{2} \delta_{\ell_q - \ell_p + m} \right\} \quad (4.48)$$

Uma vez que  $\phi_p$ ,  $\phi_q$ ,  $A^{(n,m)}$  e  $B^{(n,m)}$  são funções reais de  $\rho$  e  $z$ , podemos escrever

$$V_{p,q}^{(n,m)} = \nu_{p,q}^{(n,m)} \delta_{\ell_q - \ell_p - m} + \nu_{p,q}^{(n,m)*} \delta_{\ell_q - \ell_p + m}. \quad (4.49)$$

Podemos então afirmar que o potencial  $V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r})$  conecta estados  $p$  e  $q$ , tais que

$$|\ell_q - \ell_p| = m. \quad (4.50)$$

A fim de calcularmos os elementos de matriz  $\nu_{p,q}^{(n,m)}$  devemos levar em conta que a impureza na qual o elétron está ligado, situa-se em um ponto de coordenada  $z$ ,  $z_i$ . Por esta razão substituímos  $z$  por  $(z - z_i)$  nas equações (B.14) a (B.20).

Neste trabalho estamos analisando as transições compatíveis com as regras de seleção dadas pelo hamiltoniano de interação elétron-radiação (3.29), ou seja, vide página 46,

$$|\ell_m - \ell_n| = 1. \quad (4.51)$$

Estando os elétrons ligados no nível  $1s$ , teremos as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  e  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ . Calcularemos portanto as perturbações nos níveis relacionados com as transições acima.

Os potenciais com  $m = 0$  (B.14, B.15, B.17) apresentam elementos de matriz não nulos entre níveis de mesma componente  $z$  do momento angular.

Por tal motivo estes termos são responsáveis pela perturbação em primeira ordem. O termo  $V_{\mathbf{R}}^{(0,0)}$  já foi levado em conta no modelo MSBI, página 54, para a energia do estado fundamental de cada impureza neutra. Por ser um potencial constante ele desloca igualmente todos os níveis ligados de uma impureza, não exercendo efeito algum na energia de transição.

Temos portanto que a perturbação em primeira ordem do nível  $q$  do conjunto  $\{1s, 2p_{\pm}, 3p_{\pm}\}$  é dada por:

$$E_q^{(1)} = (-\epsilon) \langle |V_{\mathbf{R}}^{(1,0)}(\mathbf{r}) + V_{\mathbf{R}}^{(2,0)}(\mathbf{r})|q \rangle. \quad (4.52)$$

A perturbação em segunda ordem é obtida selecionando-se os elementos de matriz não nulos, tomados entre os estado a ser perturbado e os outros existentes no espectro da impureza neutra.

Temos então

$$E_{1s}^{(2)} = e^2 \left\{ \sum_{\substack{i \\ \{2s, 3s\}}} \frac{|\langle 1s | V_{\mathbf{R}}^{(1,0)}(\mathbf{r}) + V_{\mathbf{R}}^{(2,0)}(\mathbf{r}) | i \rangle|^2}{E_{1s}^{(0)} - E_i^{(0)}} + \sum_j \frac{|\langle 1s | V_{\mathbf{R}}^{(1,1)}(\mathbf{r}) + V_{\mathbf{R}}^{(2,1)}(\mathbf{r}) | j \rangle|^2}{E_{1s}^{(0)} - E_j^{(0)}} + \sum_k \frac{|\langle 1s | V_{\mathbf{R}}^{(2,2)}(\mathbf{r}) | k \rangle|^2}{E_{1s}^{(0)} - E_k^{(0)}} \right\}, \quad (4.53)$$

$$E_{2p_u}^{(2)} = e^2 \left\{ \frac{|\langle 2p_u | V_{\mathbf{R}}^{(1,0)}(\mathbf{r}) + V_{\mathbf{R}}^{(2,0)}(\mathbf{r}) | 3p_u \rangle|^2}{E_{2p_u}^{(0)} - E_{3p_u}^{(0)}} + \sum_j \frac{|\langle 2p_u | V_{\mathbf{R}}^{(1,1)}(\mathbf{r}) + V_{\mathbf{R}}^{(2,1)}(\mathbf{r}) | j \rangle|^2}{E_{2p_u}^{(0)} - E_j^{(0)}} + \sum_k \frac{|\langle 2p_u | V_{\mathbf{R}}^{(2,2)}(\mathbf{r}) | k \rangle|^2}{E_{2p_u}^{(0)} - E_k^{(0)}} \right\}, \quad (4.54)$$

Na expressão (4.54) os símbolos  $u$  e  $v$  referem-se aos sinais  $+$  e  $-$ . A perturbação em segunda ordem dos níveis  $3p_{\pm}$  é obtida fazendo-se a troca de  $2p$  por  $3p$  na expressão (4.54).

Estamos supondo que os níveis  $np_{\pm}$  sejam não degenerados, portanto devemos ter um campo magnético aplicado, ainda que fraco.

Os termos com  $n = 1$  são combinações lineares das componentes do campo elétrico na origem da impureza neutra. Este tipo de potencial é o gerado por um campo elétrico uniforme e portanto dá origem ao efeito Stark. Para uma impureza central, ou colocada em um semiconductor extenso, temos apenas o efeito Stark de segunda ordem, uma vez que, para estes casos, a paridade é um bom número quântico e o elemento de matriz da perturbação em primeira ordem se anula. Para o nosso sistema a contribuição será tanto maior quanto mais próximo das paredes do poço estiver a impureza neutra.

Já os termos com  $n = 2$  são combinações lineares das componentes do tensor simétrico de segunda ordem, “*gradiente do campo elétrico*” na posição da impureza

$$(\nabla \mathcal{E}(0))_{ij} = \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial x_j}(0) = \frac{\partial \mathcal{E}_j}{\partial x_i}(0). \quad (4.55)$$

A soma destes termos corresponde à interação do momento de quadrupolo de uma distribuição de carga perto da origem com o gradiente do campo elétrico.

O cálculo do coeficiente de absorção nos revela um alargamento de linha, fato este já observado em materiais semicondutores usuais por Larsen [La 73]. Para facilitar a análise vamos trabalhar com dopagens tipo delta, com largura tendendo a zero. Nas figuras (4.5) e (4.6) vemos que estes alargamentos não são homogêneos. Ora são dirigidos preferencialmente para a direita, ora para a esquerda, ora sem definição.

Um fenômeno interessante de se estudar é como varia a largura do coeficiente de absorção ao se alterar a compensação ou o campo magnético aplicado.

No primeiro caso, aumentando-se a compensação, mas mantendo-se constante o campo magnético, aumenta-se a largura da curva de absorção, como vemos na figura (4.7). Isto é uma consequência do aumento da desordem causada pelas impurezas ionizadas.

Já com o aumento do campo magnético, mantendo-se a compensação fixa, o efeito, bem menos paupável, é contrário, isto é, há um afinamento da

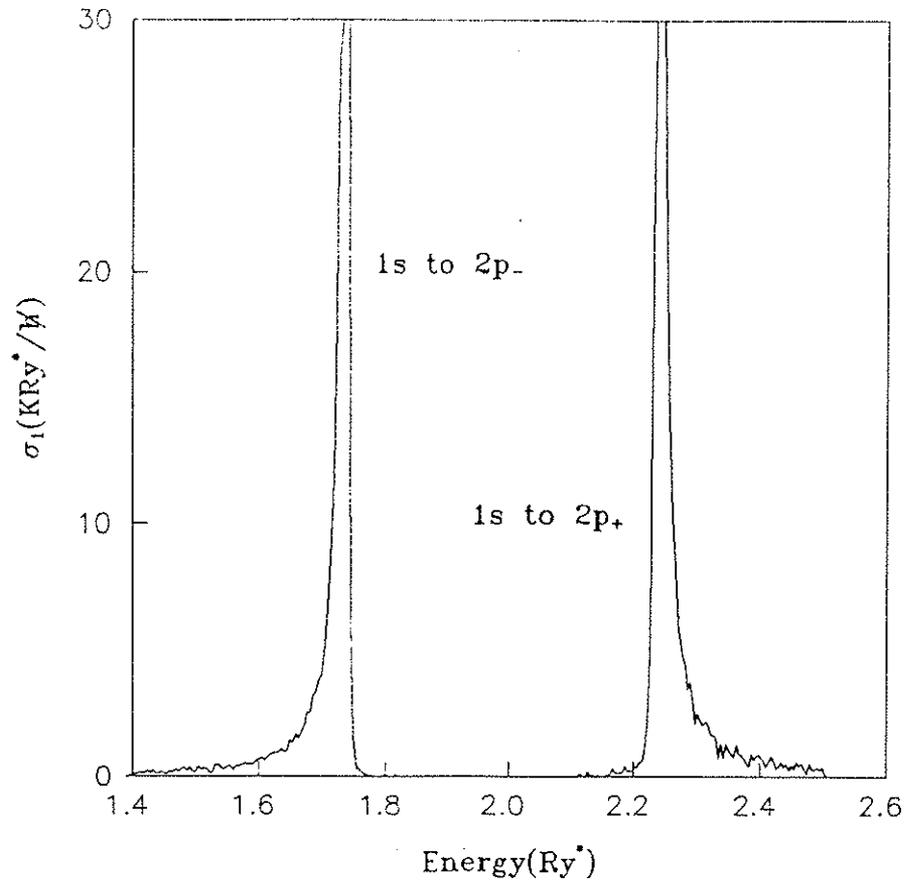


Figura 4.5: Coeficiente de absorção para as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  com dopagem tipo delta.

$\gamma = 0,5$ ,  $k = 0,2$  e  $L = 1a^*$ .

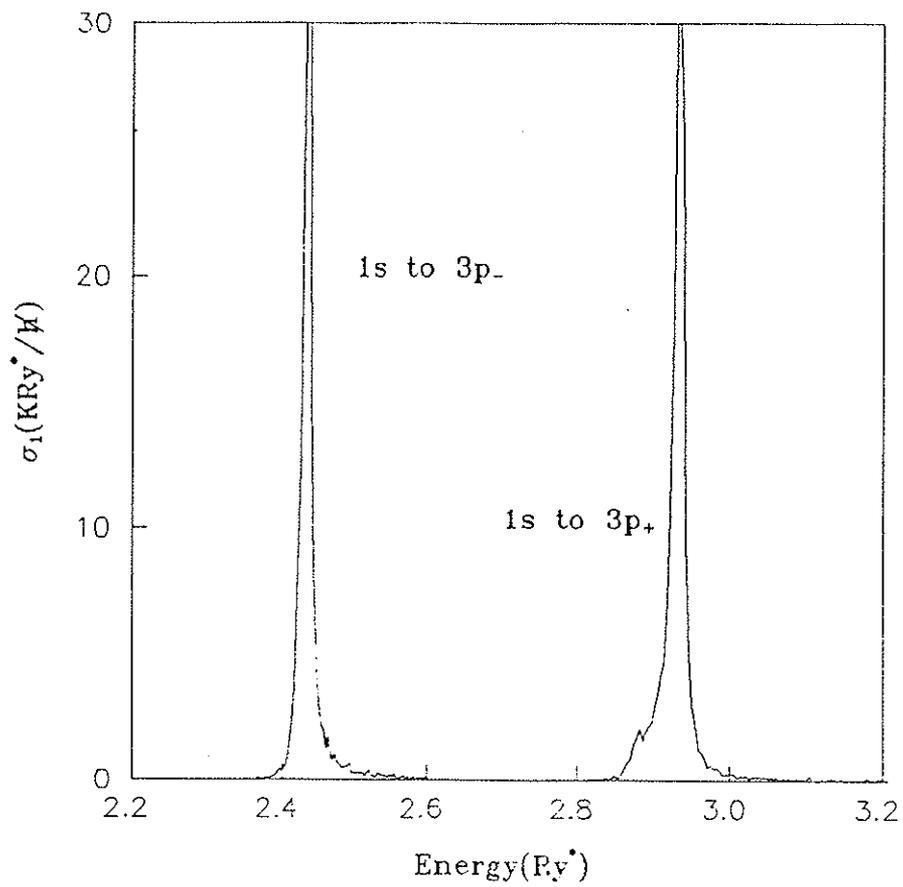


Figura 4.6: Coeficiente de absorção para as transições  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  com dopagem tipo delta.  
 $\gamma = 0,5$ ,  $k = 0,2$  e  $L = 1a^*$ .

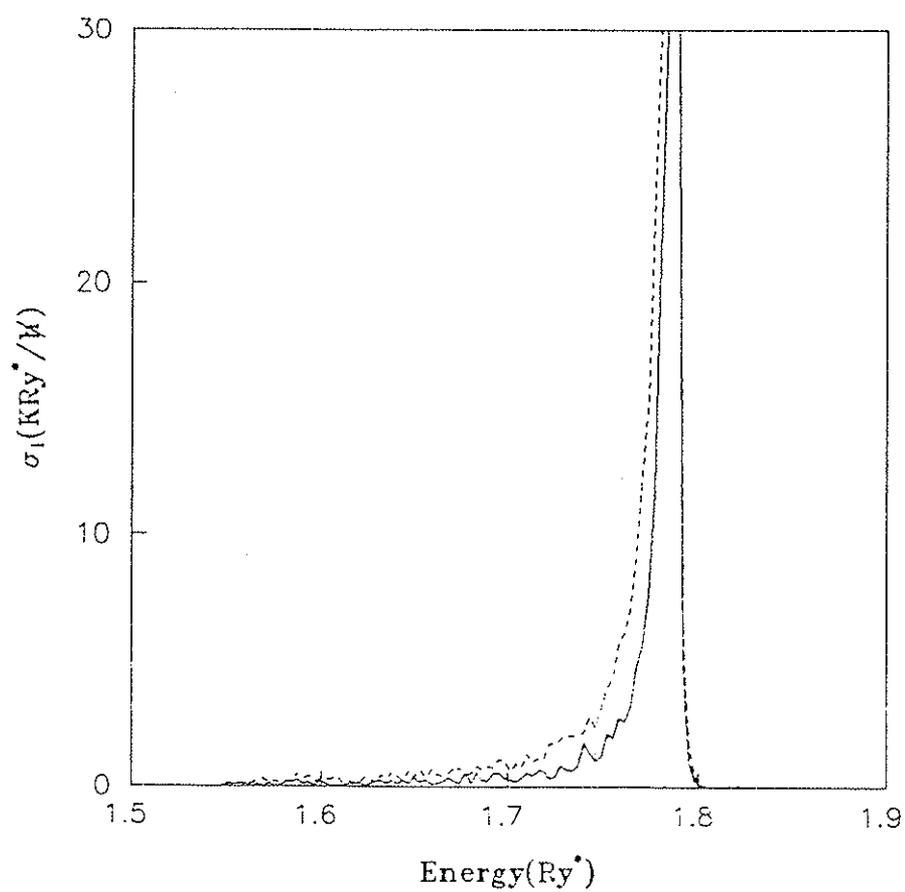


Figura 4.7: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_-$  com dopagem tipo delta para várias compensações.

$\gamma = 2,0$  e  $L = 1a^*$ .

Linha contínua -  $k = 0, 1$ .

Linha tracejada -  $k = 0, 2$

largura da curva. Aqui a perturbação causada pelas impurezas ionizadas é diminuída com o aumento do campo magnético, em virtude do maior confinamento da função de onda eletrônica e consequente redução na perturbação devida ao potencial eletrostático. Observa-se também uma mudança na posição do pico. A figura (4.8) nos mostra este efeito.

Outro efeito importante é a variação da largura das linhas, alterando-se a densidade de doadores. À medida que a densidade aumenta, diminui-se a distância média entre as impurezas e a perturbação nos níveis torna-se maior, aumentando-se a largura de linha. A figura (4.9) nos mostra este efeito.

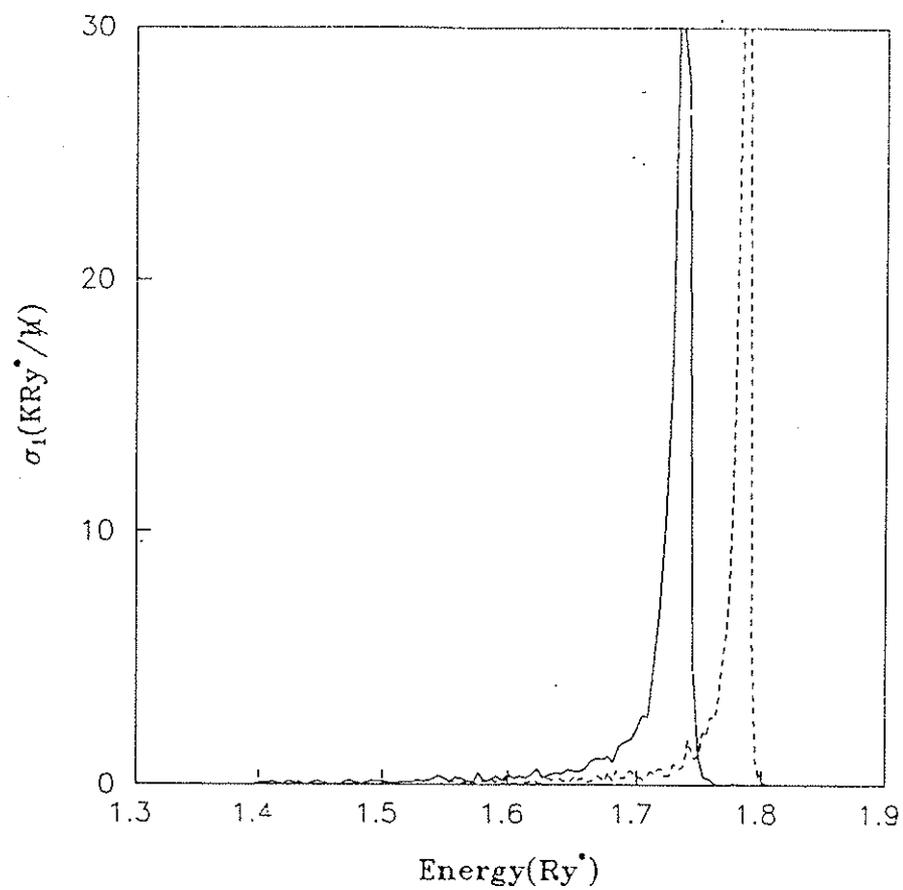


Figura 4.8: Coeficiente de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_-$  com dopagem tipo delta para vários campos magnéticos aplicados.

$k = 0,2$  e  $L = 1a^*$ .

Linha contínua -  $\gamma = 0,5$ .

Linha pontilhada -  $\gamma = 2,0$

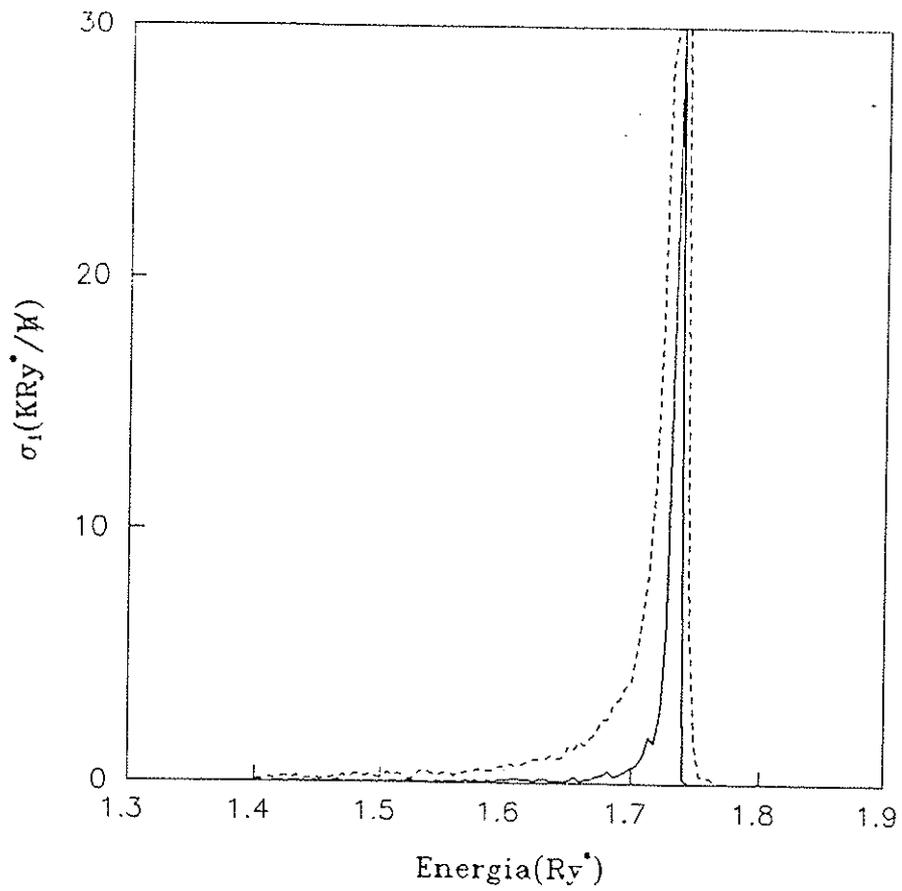


Figura 4.9: *Varição do coeficiente de absorção com a densidade de doadores.*  
 Linha contínua -  $n_D = 10^9 \text{ cm}^{-2}$   
 Linha tracejada -  $n_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

## Capítulo 5

### Comentários finais e conclusões

No decorrer desta tese fomos apresentando os resultados, dificuldades encontradas e tecendo comentários sobre cada passo dado. Neste capítulo final queremos enfatizar os pontos mais importantes.

Começamos pelo cálculo variacional. Este cálculo foi desenvolvido buscando-se integrar analiticamente os elementos de matriz do hamiltoniano. A escolha das funções hidrogenóides, em vez de gaussianas, deu-se pelo fato do teorema da massa efetiva aplicado ao problema de uma impureza rasa ser morfologicamente semelhante a do átomo de hidrogênio. Em segundo lugar, pelo fato dessas funções serem integráveis exatamente. Mais tarde, ao aplicarmos um campo magnético sobre o sistema, não nos foi possível continuar nesta linha de cálculo e nossas funções de onda passaram a conter um fator gaussiano. Foi necessário então integrar numericamente nossos elementos de matriz e tivemos a grata surpresa de obter resultados com a precisão dos anteriores e com tempos de computador até menores.

Ao tratarmos do problema com campo magnético aplicado, repensamos nossas funções de onda e o resultado foi uma simplificação naquelas que já usávamos para o caso de campo magnético nulo, com resultado ligeiramente melhor, vide figuras (2.5), (2.6) e (2.7).

Com relação ao modelo de poço quântico seguimos a linha de Bastard [Ba 81], escolhendo um poço de barreiras infinitas. Esta escolha teve um preço que foi o aumento das energias dos estados ligados e do mínimo da primeira sub-banda de condução. Principalmente esta última foi razoavel-

mente aumentada. Como consequência tivemos energias de ligação maiores que as obtidas experimentalmente. Em nosso caso, estamos interessados em energias de transição entre estados ligados e portanto o efeito da altura infinita da barreira não é tão grande.

Um fato que vem colaborar com os resultados é a aplicação de um campo magnético sobre o sistema. Seu efeito é o de confinar mais eficazmente o elétron nas proximidades do doador, diminuindo a importância da altura da barreira.

O estudo da absorção foi feito mediante o cálculo da parte real da condutividade ótica, aplicando-se a Regra de Ouro de Fermi ao hamiltoniano de interação entre a radiação eletromagnética e o elétron ligado à impureza. Um resultado importante é a diferença de intensidades, fora do pico principal de absorção, para as transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  e  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ , para uma distribuição uniforme de doadores, como vemos na figura (3.2). Há portanto uma maior probabilidade de absorção para a transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  numa região em que ambas ocorram, excetuando a região do pico da transição  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ .

Como a distribuição de impurezas em um material é aleatória, utilizamos o processo de simulação Monte Carlo. Um dos efeitos importantes calculados foi a atenuação do mínimo secundário (proveniente de impurezas localizadas nas proximidades das paredes do poço), para um perfil de dopagem uniforme. Este efeito é visto nas figuras (4.3) e (4.4). Neste ponto cabe ressaltar um aspecto importante do cálculo do coeficiente de absorção, que diferencia as distribuições uniforme e aleatória de impurezas. No primeiro modelo, a ionização dos doadores ocorre monotonicamente, das paredes do poço em direção ao centro do mesmo. Com isto temos uma curva de absorção que é zerada abruptamente, numa energia que depende da compensação do poço quântico. Já no modelo de distribuição aleatória, a ionização ocorre preferencialmente na periferia do poço, mas não totalmente. Neste caso são ionizados doadores também da região central do poço, desde que sua energia, vide equação (4.17) seja superior à de um doador na borda do poço.

Finalmente analisamos a perturbação do potencial das impurezas ionizadas sobre o coeficiente de absorção. Para visualizarmos melhor este problema, trabalhamos com dopagem tipo delta de largura nula. As transições observadas apresentam alargamentos não homogêneos, isto é, preferencialmente à direita ou à esquerda da energia de transição não perturbada, vide figuras (4.5) e (4.6). As larguras das distribuições variam com a compensação, sendo isto uma consequência direta da desordem causada pelas impurezas io-

nizadas.

Outro aspecto interessante é a variação do coeficiente de absorção com o campo magnético aplicado. Uma vez que o efeito do campo magnético é o de causar um maior confinamento eletrônico, teremos como consequência perturbações menores nas energias dos estados envolvidos nas transições, pois os elementos de matriz usados no cálculo perturbativo utilizam potenciais que são combinações lineares de  $x_i$  e  $x_i x_j$ .

A outra variável, densidade de doadores, afeta o coeficiente de absorção na medida em que altera a distância média entre as impurezas. Maior concentração resulta em maior alargamento do coeficiente de absorção, como vemos na figura (4.9).

Podemos fazer uma dopagem tipo delta e variar o campo magnético. Dessa forma estudaremos as energias de transição de impurezas localizadas numa certa altura do poço quântico em função do campo aplicado. As figuras (5.1) e (5.2) nos mostram as energias das transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  e  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  para dopagens centrais tipo delta de dois poços de larguras diferentes, em função do campo magnético. Convém notar que a energia da transição  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  permanece praticamente constante. Já as transições  $1s \rightarrow 2p_{+}$ ,  $1s \rightarrow 3p_{-}$  e  $1s \rightarrow 3p_{+}$  apresentam um aspecto linear para  $\gamma > 1$ , sendo que a última apresenta um coeficiente angular igual ao dobro das primeiras. A comparação das curvas  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  obtidas por nós com as de Jarosik [Ja 85], nos mostra um resultado ligeiramente superior da ordem de 8%, provavelmente devido ao modelo de poço quadrado infinito, que usamos. Não encontramos até o momento resultados experimentais ou teóricos referentes às transições  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ . Esperamos em breve obtê-los e compará-los com os nossos.

Como aplicação deste trabalho gostaríamos de sugerir a elaboração de filtros de radiação infravermelha distante, combinando-se o efeito de sintonização de frequência via campo magnético e tipo de filtro (faixa larga ou estreita) via dopagem e compensação do poço quântico. Outra possibilidade seria, através do estudo de diversos tipos de dopagens e de medidas de larguras médias de picos de absorção, diagnosticar estruturas de poços quânticos dopados e compensados.

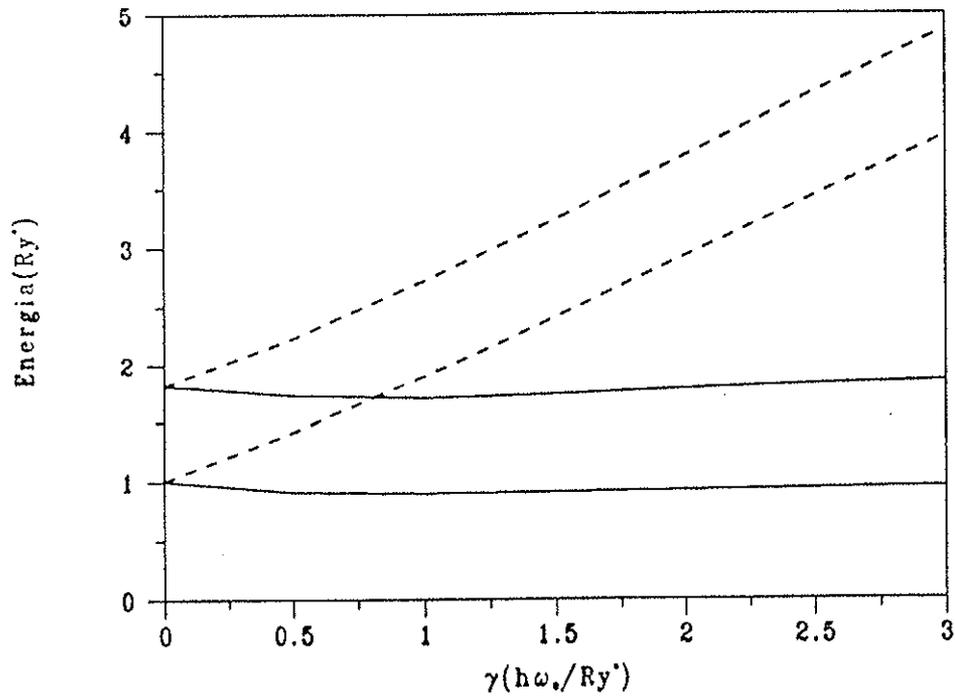


Figura 5.1: Energias das transições  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  para dopagens centrais do tipo delta, com poços quânticos de larguras diferentes, em função do campo magnético aplicado.

Linhas contínuas — transições  $1s \rightarrow 2p_-$ .

Linhas tracejadas — transições  $1s \rightarrow 2p_+$ .

Conjunto inferior —  $L = 4a^*$ .

Conjunto superior —  $L = 1a^*$ .

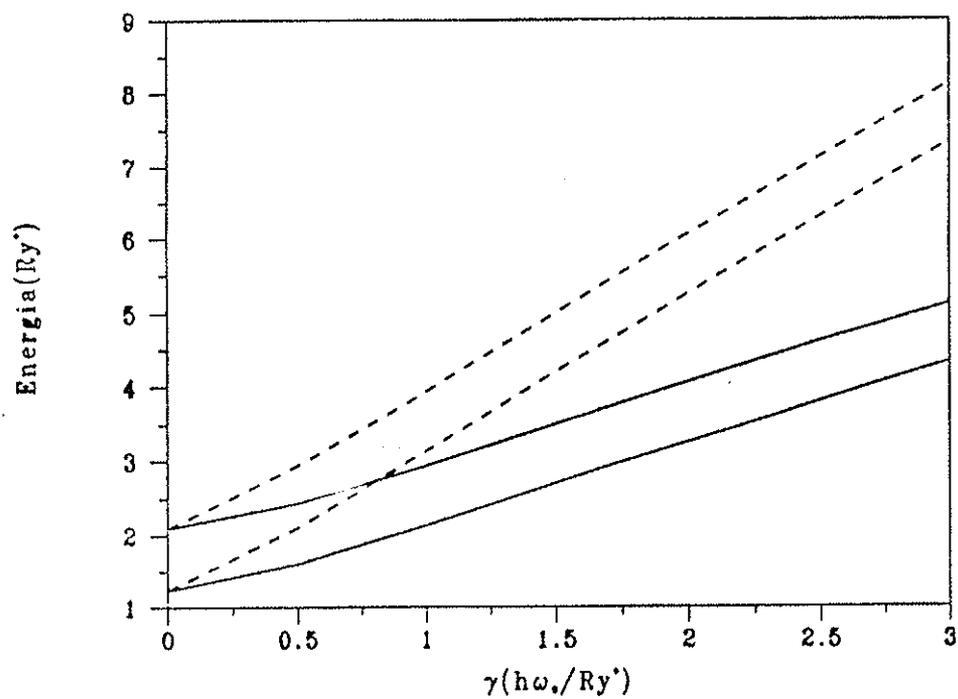


Figura 5.2: Energias das transições  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  para dopagens centrais do tipo delta, com poços quânticos de larguras diferentes, em função do campo magnético aplicado.

Linhas contínuas — transições  $1s \rightarrow 3p_{-}$ .

Linhas tracejadas — transições  $1s \rightarrow 3p_{+}$ .

Conjunto inferior —  $L = 4a^*$ .

Conjunto superior —  $L = 1a^*$ .

# Apêndice A

## Sistema efetivo de unidades

No intuito de simplificar os cálculos, podemos usar um sistema de unidades construído a partir do rydberg e raio de Bohr efetivos. Essas unidades provêm do modelo atômico de Bohr.

Seja um elétron ligado a um íon positivo localizado em um semicondutor. Este sistema é estudado classicamente através de 3 equações, a saber:

1. Energia

$$E = \frac{1}{2}m^*v^2 - \frac{e^2}{Ku} \quad (\text{A.1})$$

2. Momento angular

$$L = m^*vr \quad (\text{A.2})$$

3. 2ª lei de Newton

$$\frac{m^*v^2}{r} = \frac{e^2}{Kr^2} \quad (\text{A.3})$$

Quantizando-se o momento angular na equação (A.2)

$$L = n\hbar \quad (\text{A.4})$$

obtemos:

$$r_n = n^2a^* \quad (\text{A.5})$$

e

$$E_n = -\frac{1}{n^2}Ry^*, \quad (\text{A.6})$$

sendo  $a^*$  o raio de Bohr

$$a^* = \frac{\hbar^2 K}{m^* e^2} \quad (\text{A.7})$$

e  $Ry^*$  o rydberg

$$Ry^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 K^2} \quad (\text{A.8})$$

efetivos.

Como aplicação podemos escrever a hamiltoniana quântica do sistema acima descrito:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e^2}{Kr} \quad (\text{A.9})$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Kr} \quad (\text{A.10})$$

Em termos do sistema de unidades efetivo temos:

$$H' = \frac{H}{Ry^*} = \frac{1}{Ry^*} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}} \nabla'^2 - \frac{e^2}{K a^* r'} \right) \quad (\text{A.11})$$

Mas

$$\frac{\hbar^2}{2m^* a^{*2}} = Ry^* \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{e^2}{K a^*} = 2Ry^*, \quad (\text{A.13})$$

portanto

$$H' = -\nabla'^2 - \frac{2}{r'} \quad (\text{A.14})$$

## Apêndice B

### Expansão multipolar do potencial de uma carga puntiforme

O potencial eletrostático gerado por uma carga  $Q$  imersa em um material de constante dielétrica  $K$  e situada em  $\mathbf{R}$ , de coordenadas cartesianas  $(X, Y, Z)$  e polares esféricas  $(R, \Theta, \Phi)$ , em um ponto  $\mathbf{r}$ , de coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$  e polares esféricas  $(r, \theta, \phi)$  é dado por:

$$V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{Q}{K|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \quad (\text{B.1})$$

Calculemos agora as componentes do campo elétrico

$$\mathcal{E}_i(\mathbf{r}) = -\frac{\partial V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial x_i} \quad (\text{B.2})$$

$$= \frac{Q}{K} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R})_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^3} \quad (\text{B.3})$$

e do tensor gradiente do campo elétrico

$$\frac{\partial \mathcal{E}_i(\mathbf{r})}{\partial x_j} = -\frac{\partial^2 V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_i} \quad (\text{B.4})$$

$$= \frac{Q}{K} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^5} \left\{ |\mathbf{r} - \mathbf{R}|^2 \delta_{ij} - 3(\mathbf{r} - \mathbf{R})_i (\mathbf{r} - \mathbf{R})_j \right\} . \quad (\text{B.5})$$

Na origem das coordenadas temos:

$$V_{\mathbf{R}}(0) = \frac{Q}{KR}, \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{E}_i(0) = -\frac{QX_i}{KR^3}, \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_i(0)}{\partial x_j} = -\frac{Q}{KR^5} \{R^2 \delta_{ij} - 3X_i X_j\}. \quad (\text{B.8})$$

Convém notar que:

$$\frac{\partial \mathcal{E}_i(0)}{\partial x_j} = \frac{\partial \mathcal{E}_j(0)}{\partial x_i}. \quad (\text{B.9})$$

Isto é uma consequência da lei de Faraday para a eletrostática.

Estes valores das grandezas eletrostáticas na origem são importantes para a expansão multipolar do potencial eletrostático (B.1). Utilizando o *Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos* [Ja 67], temos para  $r < R$ :

$$V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi Q}{KR} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{1}{2n+1} \left(\frac{r}{R}\right)^n Y_{nm}^*(\Theta, \Phi) Y_{nm}(\theta, \phi), \quad (\text{B.10})$$

que, reescrita em termos de polinômios associados de Legendre com  $m \geq 0$ , fica sendo:

$$V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{Q}{KR} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \bar{\epsilon}_m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) \times \\ P_n^m(\cos \Theta) \cos [m(\Phi - \varphi)] \left(\frac{r}{R}\right)^n \quad (\text{B.11})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.12})$$

com

$$\bar{\epsilon}_m = \begin{cases} 1 & \text{para } m = 0 \\ 2 & \text{para } m \neq 0 \end{cases}. \quad (\text{B.13})$$

Substituindo os valores dos polinômios associados de Legendre na equação (B.12), podemos identificar neles o potencial, campo e gradiente de

campo elétrico gerados por  $Q$  na origem, dados pelas equações (B.6,B.7,B.8). Obtemos finalmente as seguintes expressões para  $V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r})$ , para  $0 \leq n \leq 2$ :

$$V_{\mathbf{R}}^{(0,0)}(\mathbf{r}) = V_{\mathbf{R}}(0), \quad (\text{B.14})$$

$$V_{\mathbf{R}}^{(1,0)}(\mathbf{r}) = -\mathcal{E}_z(0)z, \quad (\text{B.15})$$

$$V_{\mathbf{R}}^{(1,1)}(\mathbf{r}) = -(\mathcal{E}_x(0)x + \mathcal{E}_y(0)y), \quad (\text{B.16})$$

$$V_{\mathbf{R}}^{(2,0)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4}(3z^2 - r^2)\frac{\partial \mathcal{E}_z(0)}{\partial z}, \quad (\text{B.17})$$

$$V_{\mathbf{R}}^{(2,1)}(\mathbf{r}) = -z \left( x \frac{\partial \mathcal{E}_z(0)}{\partial x} + y \frac{\partial \mathcal{E}_z(0)}{\partial y} \right) \quad (\text{B.18})$$

$$= -z \left( \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{E}_z(0) - z \frac{\partial \mathcal{E}_z(0)}{\partial z} \right), \quad (\text{B.19})$$

$$V_{\mathbf{R}}^{(2,2)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4}(x^2 - y^2) \left( \frac{\partial \mathcal{E}_x(0)}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{E}_y(0)}{\partial y} \right) - xy \frac{\partial \mathcal{E}_y(0)}{\partial x}. \quad (\text{B.20})$$

A série (B.12) é rapidamente convergente para  $R \gg r$  pois:

$$V_{\mathbf{R}}^{(n,m)}(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{R} \left( \frac{r}{R} \right)^n. \quad (\text{B.21})$$

Outra observação sobre a série (B.12) é que ela corresponde à série de Taylor de  $V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  em torno da origem, como vemos a seguir:

$$V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = V_{\mathbf{R}}(0) + \nabla(V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}))|_{\mathbf{r}=0} \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2} x_i x_j \frac{\partial^2 V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{r}=0} + \dots \quad (\text{B.22})$$

$$= V_{\mathbf{R}}(0) - \mathcal{E}(0) \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2} x_i x_j \frac{\partial \mathcal{E}_i(0)}{\partial x_j} + \dots, \quad (\text{B.23})$$

onde usamos a convenção de que índices repetidos indicam somatórias nos respectivos índices.

Os termos constante e o linear em (B.23) são trivialmente conectados com os termos com  $n = 0, 1$  em (B.12). Para obtermos a correspondência

entre o termo quadrático em (B.23) e os termos com  $n = 2$  em (B.12) basta somarmos os últimos e lembrarmos que, em virtude da Lei de Gauss,

$$\nabla \cdot \mathcal{E}(0) = 0. \quad (\text{B.24})$$

A energia eletrostática de uma distribuição de cargas nas proximidades da origem, devida a uma carga  $Q$  externa, é então dada por

$$U_{\mathbf{R}} = \int \rho(\mathbf{r}) V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (\text{B.25})$$

$$= qV_{\mathbf{R}}(0) - \mathbf{p} \cdot \mathcal{E}(0) - \frac{1}{6} Q_{ij} \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial x_j}(0) + \dots, \quad (\text{B.26})$$

onde

$$q = \int \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (\text{B.27})$$

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (\text{B.28})$$

e

$$Q_{ij} = \int (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (\text{B.29})$$

são a carga total, o momento de dipolo e a componente  $ij$  do momento de quadrupolo da distribuição de cargas, respectivamente.

## Apêndice C

### O átomo de hidrogênio confinado em duas dimensões

A situação abordada neste apêndice é ideal. Ela corresponde a um elétron ligado a um potencial coulombiano e confinado em duas dimensões. Um dos sistemas físicos que mais se aproximam deste modelo é o de um elétron ligado a uma impureza rasa em um poço quântico. Esta aproximação é tanto melhor, quanto menor for a largura do poço, na aproximação de poço quadrado infinito. Referências a este estudo podem ser encontradas em [Fl 52] e [Gh 89].

Consideremos uma carga positiva unitária  $|e|$ , localizada na origem do sistema de coordenadas polares em um plano. Um elétron, de carga  $e$  e massa  $m$ , liga-se a esta carga positiva através da energia potencial eletrostática

$$V(\rho) = -\frac{e^2}{\rho}. \quad (\text{C.1})$$

Dessa forma, a hamiltoniana do sistema fica sendo:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{\rho} \quad (\text{C.2})$$

que, reescrita em termos de unidades efetivas vide apêndice A torna-se:

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{\rho} \quad (\text{C.3})$$

$$= -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\rho} \quad (\text{C.4})$$

Escrevendo a equação de Schrödinger

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\rho} \right\} \psi(\rho, \varphi) = E \psi(\rho, \varphi), \quad (\text{C.5})$$

vemos que as variáveis se separam e que podemos escrever a função de onda como:

$$\psi(\rho, \varphi) = u(\rho) e^{i\mu\varphi} \quad (\text{C.6})$$

com  $\mu$  sendo um número inteiro. Isto se deve ao fato de que:

$$[L_z, H] = 0. \quad (\text{C.7})$$

Substituindo-se (C.6) na equação de Schrödinger e tomando-se

$$E = -\gamma^2 \quad (\text{C.8})$$

pois estamos interessados em estados ligados, obtemos:

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{\mu^2}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right\} u = -\gamma^2 u. \quad (\text{C.9})$$

Podemos simplificar esta equação através da transformação

$$u(\rho) = \rho^{-\frac{1}{2}} f(\rho) \quad (\text{C.10})$$

que, introduzida na equação (C.9), nos dá:

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \left( \frac{2}{\rho} - \gamma^2 - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right) f = 0. \quad (\text{C.11})$$

A análise dos limites de  $\rho$ , na equação acima nos dá as seguintes formas assíntotas para  $f(\rho)$

$$f(\rho) \rightarrow \begin{cases} \rho^{(|\mu| + \frac{1}{2})} & \text{para } \rho \rightarrow 0 \\ e^{-\gamma\rho} & \text{para } \rho \rightarrow \infty \end{cases}, \quad (\text{C.12})$$

portanto procuramos uma solução do tipo

$$f(\rho) = \rho^{(|\mu| + \frac{1}{2})} e^{-\gamma\rho} g(\rho). \quad (\text{C.13})$$

Substituindo-se a função acima na equação (C.11) obtemos a equação diferencial

$$\rho \frac{d^2 g}{d\rho^2} + (2|\mu| + 1 - 2\gamma\rho) \frac{dg}{d\rho} - 2\gamma \left( |\mu| + \frac{1}{2} - \frac{1}{\gamma} \right) g = 0 \quad (\text{C.14})$$

que, após a mudança de variáveis

$$z = 2\gamma\rho \quad (\text{C.15})$$

transforma-se em

$$z \frac{d^2 g}{dz^2} + (2|\mu| + 1 - z) \frac{dg}{dz} - \left( |\mu| + \frac{1}{2} - \frac{1}{\gamma} \right) g = 0 \quad (\text{C.16})$$

cujas soluções podem ser expressas em termos de funções hipergeométricas confluentes [Ab 64], conforme vemos abaixo:

$$g_1(z) = F\left(|\mu| + \frac{1}{2} - \frac{1}{\gamma}, 2|\mu| + 1; z\right), \quad (\text{C.17})$$

$$g_2(z) = z^{-2|\mu|} F\left(-|\mu| + \frac{1}{2} - \frac{1}{\gamma}, -2|\mu| + 1; z\right). \quad (\text{C.18})$$

A segunda equação não serve pois diverge para  $z \rightarrow 0$ . Para garantir a convergência de  $g_1$  no limite de  $z \rightarrow \infty$ , temos que impor que

$$|\mu| + \frac{1}{2} - \frac{1}{\gamma} = -n_\rho \quad (\text{C.19})$$

com  $n_\rho$  sendo um número inteiro não negativo. Neste caso  $g_1(z)$  torna-se um polinômio de grau  $n_\rho$ . Caso contrário, teríamos

$$g_1(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^z. \quad (\text{C.20})$$

Definindo o número quântico principal como sendo

$$N = |\mu| + n_\rho + 1, \quad (\text{C.21})$$

portanto um número inteiro positivo, temos:

$$\gamma N = \frac{2}{2N - 1} \quad (\text{C.22})$$

$$E_N = \frac{4}{(2N - 1)^2} \quad (\text{C.23})$$

Voltando à função (C.6), temos

$$\psi_{N,\mu} = A_{N,|\mu|} e^{i\mu\varphi} \rho^{|\mu|} P_{n_\rho,|\mu|}(\rho) e^{-\gamma N \rho} \quad (\text{C.24})$$

com

$$P_{n_\rho,|\mu|}(\rho) = F(-n_\rho, 2|\mu| + 1, 2\gamma\rho) \quad (\text{C.25})$$

e  $A_{N,|\mu|}$  sendo a constante de normalização.

Da definição das funções hipergeométricas confluentes [Ab 64] e [La 66]:

$$F(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b}z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (\text{C.26})$$

temos:

$$F(0, 2|\mu| + 1; 2\gamma\rho) = 1, \quad (\text{C.27})$$

$$F(-1, 2|\mu| + 1; 2\gamma\rho) = 1 - \frac{2\gamma}{2|\mu| + 1} \rho, \quad (\text{C.28})$$

$$F(-2, 2|\mu| + 1; 2\gamma\rho) = 1 - \frac{4\gamma}{2|\mu| + 1} \rho + \frac{2\gamma^2}{2\mu^2 + 3|\mu| + 1} \rho^2, \quad (\text{C.29})$$

etc.

Na tabela (C.1) temos listados os vários parâmetros, bem como os polinômios, que aparecem nas funções de onda dos estados com  $N \leq 3$ .

Tabela C.1: *Estados, parâmetros e polinômios das funções de onda do átomo de hidrogênio em 2D.*

As unidades usadas são efetivas.

Estado	N	$ \mu $	$n_\rho$	$\gamma_N$	$E_N$	$P_{n_\rho, \mu }(\rho)$
1s	1	0	0	2	-4	1
2s	2	0	1	2/3	-4/9	$1 - 4/3\rho$
2p $_{\pm}$	2	1	0	2/3	-4/9	1
3s	3	0	2	2/5	-4/25	$1 - 8/5\rho + 8/25\rho^2$
3p $_{\pm}$	3	1	1	2/5	-4/25	$1 - 4/15\rho$
3d $_{\pm 2}$	3	2	0	2/5	-4/25	1

## Apêndice D

### O método variacional

Uma maneira elegante de formularmos a mecânica clássica é através de princípios variacionais [Go 80]. Através deles obtemos as equações de Lagrange e de Hamilton. Do mesmo modo podemos formular um princípio variacional para a mecânica quântica [La 66], [Me 70] e [Ar 85, pag 954-956], obtendo a equação de Schrödinger e o espectro de energia do sistema. Neste apêndice analisaremos o método de obtenção dos níveis de energia, através do princípio variacional.

Seja a integral

$$I = \int \psi^* H \psi dq \quad (\text{D.1})$$

sendo  $H$  a hamiltoniana do sistema,

$$\psi = \psi(\lambda, q) \quad (\text{D.2})$$

uma função das coordenadas  $\{q\}$  do espaço de configuração e dos parâmetros  $\{\lambda\}$  e  $dq$  o elemento de volume no espaço de configuração.

O princípio variacional nos diz que, dada a condição:

$$\int \psi^* \psi dq = 1, \quad (\text{D.3})$$

as energias do sistema podem ser obtidas variando-se  $\{\lambda\}$ , de modo que

$$\delta I = 0. \quad (\text{D.4})$$

Usamos, neste processo de extremização, o método dos multiplicadores de Lagrange [Bo 66], [Ar 85], ou seja

$$\delta \int [\psi^* H \psi - E \psi^* \psi] dq = 0, \quad (\text{D.5})$$

Portanto, o espectro  $\{E\}$  de energias do sistema provém dos valores extremos de  $I$ . O problema de se determinar o tipo de extremo pode ser resolvido do seguinte modo:

Sejam  $\phi_n(q)$  e  $E_n$  as autofunções não degeneradas e as auto-energias do sistema

$$H\phi_n(q) = E_n\phi_n(q) \quad (\text{D.6})$$

com

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots \quad (\text{D.7})$$

e escolhamos as funções variacionais da seguinte forma

$$\psi_n(\lambda, q) = \sum_i a_i^{(n)}(\lambda)\phi_n(q) . \quad (\text{D.8})$$

A condição de normalização (D.3) nos assegura que

$$\sum_j |a_j^{(n)}(\lambda)|^2 = 1 \quad (\text{D.9})$$

e que a energia do  $n$ -ésimo estado é um extremo de

$$I_n = \int \psi_n^*(\lambda, q)H\psi_n(\lambda, q)dq \quad (\text{D.10})$$

$$= \sum_j |a_j^{(n)}(\lambda)|^2 E_j . \quad (\text{D.11})$$

Chamando-se

$$\Delta E_{n,m} = E_n - E_m , \quad (\text{D.12})$$

temos, utilizando a condição de normalização (D.9)

$$I_n = E_n - \sum_{j=0}^{n-1} |a_j^{(n)}(\lambda)|^2 \Delta E_{n,j} + \sum_{j=n+1}^{j_{\max}} |a_j^{(n)}(\lambda)|^2 \Delta E_{j,n} . \quad (\text{D.13})$$

Para o nível fundamental ( $n = 0$ ) temos:

$$I_0 = E_0 - \sum_{j=1}^{j_{\max}} |a_j^{(0)}(\lambda)|^2 \Delta E_{j,0} , \quad (\text{D.14})$$

logo

$$I_0 \geq E_0 \quad (\text{D.15})$$

e temos uma condição de mínimo.

Esta situação não ocorre para os outros níveis, pois de acordo com (D.13)  $I_n$  é o resultado da adição e subtração de quantidades positivas sobre  $E_n$ . Se, entretanto, impusermos condições de ortogonalidade de  $\psi_n$  sobre os demais  $\psi_m$  com  $m < n$ , ou seja:

$$\int \psi_n^*(\lambda, q) \psi_m(\lambda_m, q) dq = 0, \quad (\text{D.16})$$

com  $\lambda_m$  sendo o valor de  $\lambda$  que extrema  $I_m$ , obteremos

$$\sum_{j=0}^{j_{\max}} a_j^{(n)}(\lambda)^* a_j^{(m)}(\lambda_m) = 0. \quad (\text{D.17})$$

Mas

$$a_j^{(m)}(\lambda_m) = \begin{cases} 1 & j = m \\ 0 & j \neq m \end{cases} \quad (\text{D.18})$$

pois

$$\psi_m(\lambda_m, q) = \phi(q), \quad (\text{D.19})$$

então de (D.17) obtemos

$$a_m^{(n)}(\lambda) = 0 \quad (\text{D.20})$$

e portanto a expressão (D.13) torna-se:

$$I_n = E_n + \sum_{j=n+1}^{j_{\max}} |a_j^{(n)}(\lambda)|^2 \Delta E_{j,n} \quad (\text{D.21})$$

$$\geq E_n \quad (\text{D.22})$$

resultando um processo de *minimização* de  $I_n$ .

Para o caso de degenerescência, podemos separar as auto-funções do Hamiltoniano em conjuntos de funções com mesma simetria. Dessa forma cada conjunto será não degenerado e as relações (D.15) e (D.22) se aplicam a cada um deles.

O princípio variacional então nos garante que, conhecidas as  $(n-1)$  auto-funções do Hamiltoniano, com energias em ordem crescente, a função de onda do  $n$ -ésimo estado é tal que minimiza a integral

$$I_n(\lambda) = \int \psi_n^*(\lambda, q) H \psi_n(\lambda, q) dq \quad (\text{D.23})$$

com as condições suplementares

$$\int |\psi_n(\lambda, q)|^2 dq = 1, \quad (\text{D.24})$$

$$\int \psi_n^*(\lambda, q) \phi_m(q) dq = 0, \quad (\text{D.25})$$

com

$$0 \leq m < n. \quad (\text{D.26})$$

Baseando-se no *princípio variacional* podemos estabelecer o *método variacional* para calcular o espectro de um Hamiltoniano dado. Uma vez que o cálculo variacional não é exato, as funções de onda obtidas não serão puras. Elas sempre contêm combinações lineares de outras funções do espectro, de modo que a relação (D.18) não se obtém e portanto não podemos garantir o mínimo de  $I_n(\lambda)$ , mas apenas seu extremo.

O sucesso de um cálculo variacional depende de uma boa escolha de funções de onda. Em geral as funções de onda de outros sistemas, semelhantes ao que estamos tratando, servem de modelo para as novas funções.

Para testar o método variacional, selecionamos um problema conhecido: o *poço infinito unidimensional*. Seu Hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (\text{D.27})$$

com

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } |x| < L/2 \\ \infty, & \text{se } |x| \geq L/2 \end{cases}. \quad (\text{D.28})$$

As soluções deste problema dividem-se em pares,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (\text{D.29})$$

com  $n$  *ímpar* e *ímpares*

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (\text{D.30})$$

com  $n$  *par*.

O espectro de energias para ambos os tipos de estado é dado por

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (\text{D.31})$$

As funções variacionais foram construídas de modo a apresentar a simetria do estado, no caso a paridade, e o número de nodos característico do mesmo. Desta forma as funções de onda dos estados pares foram escolhidas como:

$$\psi_1(\alpha_1, x) = A_1 \left\{ x^2 - \left(\frac{L}{2}\right)^2 \right\} e^{\alpha_1 x^2}, \quad (\text{D.32})$$

$$\psi_3(\alpha_3, x) = A_3 \left\{ \left(x^4 - \left(\frac{L}{2}\right)^4\right) + \gamma \left(x^2 - \left(\frac{L}{2}\right)^2\right) \right\} e^{\alpha_3 x^2}, \quad (\text{D.33})$$

$$\begin{aligned} \psi_5(\alpha_5, x) = A_5 \left\{ \left(x^6 - \left(\frac{L}{2}\right)^6\right) + \delta \left(x^4 - \left(\frac{L}{2}\right)^4\right) \right. \\ \left. + \epsilon \left(x^2 - \left(\frac{L}{2}\right)^2\right) \right\} e^{\alpha_5 x^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

A concordância do cálculo variacional com a solução algébrica é mostrada na tabela (D.1). Podemos também comparar as posições dos nodos da função de onda, por exemplo,  $\psi_5$ , obtidas algebricamente e variacionalmente. A tabela (D.2) nos mostra as posições dos dois nodos situados à direita da origem, para os dois tipos de cálculo.

Finalmente vamos descrever o algoritmo de cálculo de extremo de uma função. O método consiste em se obter o extremo de uma parábola construída a partir de três pontos de abscissas  $x_0 - \Delta x$ ,  $x_0$ ,  $x_0 + \Delta x$  do gráfico da função  $f(x)$ , com  $x_0$  e  $\Delta x$  sendo dois valores arbitrários. Seja  $x_1$  a abscissa deste extremo. Compara-se os valores da função nos pontos de abscissas  $x_0$  e  $x_1$ . Se o módulo da diferença relativa entre estes dois valores for inferior a um determinado valor (previamente escolhido), por exemplo  $10^{-3}$ , obtivemos então o extremo da função. Caso contrário repetimos a procedimento.

Para o caso de uma função de duas variáveis, digamos  $f(x, y)$ , fixa-se uma delas, por exemplo  $y = y_0$ , e obtém-se o extremo de uma parábola construída através de três pontos de abscissas  $x_0 - \Delta x$ ,  $x_0$ ,  $x_0 + \Delta x$  da função  $f(x, y_0)$ . Sendo  $x_1$  a abscissa deste extremo, calculamos o extremo de outra

Tabela D.1: *Energias dos três primeiros estados pares de um poço quadrado unidimensional infinito, obtidas algebricamente e variacionalmente.*  
 Obs. Energias em unidades efetivas.

estado	sol. algeb.	calc. variac.
1	$9,869604 \times 10^{-2}$	$9,869624 \times 10^{-2}$
3	$8,8826 \times 10^{-1}$	$8,8842 \times 10^{-1}$
5	2,4674	2,4695

Tabela D.2: *Posições dos dois nodos à direita da origem para a função de onda  $\psi_5$  de um poço quadrado infinito.*

nodo	sol. algeb.	calc. variac.
1	1,0	0,98975
2	3,0	2,98969

parábola construída dos pontos da função  $f(x, y)$  cujas abscissas sejam  $y_0 - \Delta y, y_0, y_0 + \Delta y$ . Seja  $y_1$  a abscissa do novo extremo. Comparamos então os valores das funções nos pontos  $(x_0, y_0)$  e  $(x_1, y_1)$  e repetimos o procedimento tantas vezes quantas forem necessárias para atingir a precisão pré-determinada.

## Apêndice E

# Polarização e superposição das funções de onda de átomos hidrogenóides

Neste apêndice calculamos primeiramente a energia de polarização de um átomo hidrogenóide, no caso um elétron ligado a um centro doador raso, causada pelo potencial eletrostático de uma impureza ionizada. Em seguida calculamos a superposição das funções de onda (quantum overlap) de dois átomos hidrogenóides. Adotamos como hipótese que a densidade de doadores ( $N_D$ ) é muito baixa, de modo que a distância média entre doadores

$$R = N_D^{-1/3} \quad (\text{E.1})$$

seja muito grande comparada com o raio de Bohr ( $a^*$ ), vide eq. (A.7), do material, ou seja:

$$\frac{a^*}{R} \ll 1 \quad (\text{E.2})$$

ou

$$N_D a^{*3} \ll 1. \quad (\text{E.3})$$

A polarização de uma impureza doadora neutra por uma impureza ionizada é um efeito muito pequeno. Usando-se o modelo de deslocamento uniforme ( $b$ ) da função de onda eletrônica na direção da reta que une as duas impurezas, deveremos obter

$$b \ll a^*. \quad (\text{E.4})$$

Colocando-se a impureza neutra no centro do sistema de coordenadas e a impureza ionizada no ponto  $\mathbf{R}$ , obtemos o seguinte hamiltoniano para o sistema

$$H_{\mathbf{R}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Kr} + U_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}), \quad (\text{E.5})$$

com

$$U_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = -e(V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) - V_{\mathbf{R}}(0)), \quad (\text{E.6})$$

onde  $V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  é o potencial da impureza ionizada, vide equação (B.1). Estamos utilizando a AME, página 3, e considerando o doador neutro como um centro puntiforme de carga  $e$  mais um elétron ligado.

Admitindo-se o modelo de deslocamento uniforme da nuvem eletrônica, vamos fazer o cálculo variacional com a seguinte função de onda para o elétron

$$\psi(\mathbf{r}) = C e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}}, \quad (\text{E.7})$$

onde  $a^*$  é o raio de Bohr efetivo, vide apêndice A, e  $C$  é a constante de normalização, dada por

$$C = (\pi a^{*3})^{-1/2}, \quad (\text{E.8})$$

independentemente de  $|\mathbf{b}|$ .

Colocando-se a impureza neutra na origem e a ionizada sobre o eixo  $x$ , temos

$$\mathbf{R} = R\hat{x} \quad (\text{E.9})$$

$$\mathbf{b} = b\hat{x}. \quad (\text{E.10})$$

A figura (E.1) nos mostra um esquema do sistema composto por um doador neutro na presença de um doador ionizado. Para um aceitador ionizado, teríamos um deslocamento contrário da nuvem eletrônica.

Portanto a energia do sistema, em função do parâmetro variacional  $b$ , é dada por

$$E(b, R) = C^2 \int e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Kr} + U_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \right) e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} d^3\mathbf{r} \quad (\text{E.11})$$

Dividimos a integral acima em três partes, segundo as parcelas do integrando. A primeira delas

$$I_1 = C^2 \int e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \right) e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} d^3\mathbf{r} \quad (\text{E.12})$$

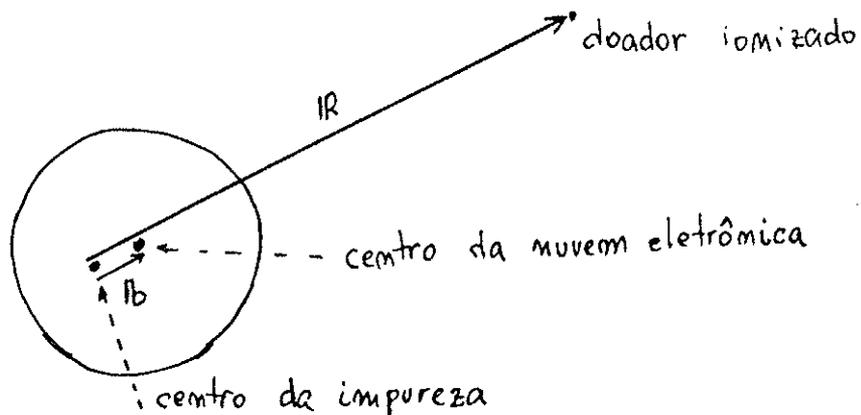


Figura E.1: Esquema de deslocamento uniforme da nuvem eletrônica causado pela proximidade de um doador ionizado.

pode ser calculada fazendo-se a mudança de variáveis

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{b}. \quad (\text{E.13})$$

A partir da propriedade

$$\nabla^2 f(\mathbf{r}) = \nabla'^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{b}), \quad (\text{E.14})$$

onde  $\nabla'^2$  é o laplaciano nas novas coordenadas, temos

$$I_1 = C^2 \int e^{-r/a^*} \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla'^2 \right) e^{-r/a^*} d^3\mathbf{r} \quad (\text{E.15})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m^* a^*} \quad (\text{E.16})$$

e portanto independente do parâmetro variacional.

A segunda integral

$$I_2 = -C^2 \frac{e^2}{K} \int e^{-2|\mathbf{r}-\mathbf{b}|/a^*} \frac{1}{r} d^3\mathbf{r} \quad (\text{E.17})$$

pode ser calculada fazendo-se a mesma mudança de variáveis. Portanto

$$I_2 = -C^2 \frac{e^2}{K} \int e^{-\frac{2r'}{a^*}} \frac{1}{|r' + \mathbf{b}|} d^3 \mathbf{r} \quad (\text{E.18})$$

Expandindo-se o termo  $1/|r' + \mathbf{b}|$  em polinômios de Legendre, vide [Ja 67], temos

$$\frac{1}{|r + \mathbf{b}|} = \frac{1}{|r - (-\mathbf{b})|} \quad (\text{E.19})$$

$$= \frac{1}{r_{>}} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(-\cos \theta) \left( \frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^n \quad (\text{E.20})$$

$$= \frac{1}{r_{>}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n P_n(\cos \theta) \left( \frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^n, \quad (\text{E.21})$$

onde  $r_{>}$  e  $r_{<}$  são os valores de  $|\mathbf{r}|$  e  $|\mathbf{b}|$  tomados em ordem decrescente. Levando-se em consideração a ortogonalidade dos polinômios de Legendre, apenas o termo de ordem zero dará contribuição à integral (E.18). Temos portanto

$$I_2 = -\frac{e^2}{K a^*} \left\{ \frac{a^*}{b} \left( 1 - e^{-\frac{2b}{a^*}} \right) - e^{-\frac{2b}{a^*}} \right\}. \quad (\text{E.22})$$

A última integral

$$I_3 = C^2 \int e^{-\frac{2|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} U_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (\text{E.23})$$

pode ser reescrita como

$$I_3 = -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}(0) - \frac{1}{6} Q_{ij} \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial x_j}(0) + \dots \quad (\text{E.24})$$

segundo a expressão (B.26), com uma densidade de carga dada por

$$\rho(\mathbf{r}) = -eC^2 e^{-\frac{2|\mathbf{r}-\mathbf{b}|}{a^*}} \quad (\text{E.25})$$

Como temos uma densidade de carga esfericamente simétrica, centrada no ponto  $\mathbf{b}$ , o cálculo de multipolos se faz como se tivéssemos uma carga

$(-e)$ , puntiforme, no ponto  $\mathbf{b}$ . Portanto

$$\mathbf{p} = -eb \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.26})$$

e

$$\mathbf{Q} = -eb^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{E.27})$$

O campo elétrico e seu gradiente na origem são dados por, vide equações (B.7) e (B.8):

$$\mathcal{E}(0) = \mp \frac{e}{KR^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.28})$$

e

$$\nabla \mathcal{E}(0) = \pm \frac{e}{KR^3} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{E.29})$$

onde o duplo sinal corresponde a um doador ou aceitador ionizado, respectivamente. Portanto

$$I_3 = \pm \frac{e^2 b}{KR^2} \left( -1 + \frac{b}{R} \right) \quad (\text{E.30})$$

De posse destes três resultados temos

$$E(b, R) = \frac{\hbar^2}{2m^* a^*} - \frac{e^2}{K a^*} \left\{ \left[ \frac{a^*}{b} \left( 1 - e^{-\frac{2b}{a^*}} \right) - e^{-\frac{2b}{a^*}} \right] + \left[ \pm \left( \frac{a^*}{R} \right)^2 \right] \frac{b}{a^*} \left[ 1 - \frac{b}{a^*} \frac{a}{R} \right] \right\}. \quad (\text{E.31})$$

Devemos então calcular o mínimo de  $E(b, R)$ . A equação

$$\frac{dE(b, R)}{db} = 0 \quad (\text{E.32})$$

é transcendental e deve ser resolvida numericamente. Porém, devido ao fato de se esperar que a equação (E.4) seja válida, faremos uma expansão até a primeira ordem em  $(b/a^*)$  na equação (E.32), ou seja

$$\begin{aligned} \frac{dE(b, R)}{db} &= -\frac{e^2}{Ka^{*2}} \left\{ - \left[ \left( \frac{a^*}{b} \right)^2 \left( 1 - e^{-\frac{2b}{a^*}} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 2 \left( \left( \frac{a^*}{b} \right) + 1 \right) e^{-\frac{2b}{a^*}} \right] \pm \left( \frac{a^*}{R} \right)^2 \left[ 1 - 2 \left( \frac{b}{a^*} \right) \frac{a}{R} \right] \right\} \quad (\text{E.33}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{e^2}{Ka^{*2}} \left\{ \pm \left( \frac{a^*}{R} \right)^2 - \left( \frac{b}{a^*} \right) \left[ \frac{4}{3} \mp 2 \left( \frac{a^*}{R} \right)^3 \right] \right\} \\ &= 0. \quad (\text{E.34}) \end{aligned}$$

Da condição (E.2) obtemos

$$\frac{b}{a^*} = \frac{3}{4} \left( \frac{a^*}{R} \right)^2 + O \left( \frac{a^*}{R} \right)^5 \quad (\text{E.35})$$

confirmando nossa previsão (E.4).

Expandindo-se (E.31) até primeira ordem em  $(b/a^*)$ , obtemos

$$E(b, R) = -\frac{e^2}{Ka^*} \left\{ \frac{1}{2} \pm \left( \frac{a^*}{R} \right)^2 \left( \frac{b}{a^*} \right) \right\} \quad (\text{E.36})$$

No limite

$$R \rightarrow \infty \quad (\text{E.37})$$

temos

$$b = 0. \quad (\text{E.38})$$

Neste caso  $E(0, \infty)$  é a energia de um átomo hidrogenóide sem perturbação externa, ou seja

$$E(0, \infty) = -\frac{e^2}{2Ka^*}. \quad (\text{E.39})$$



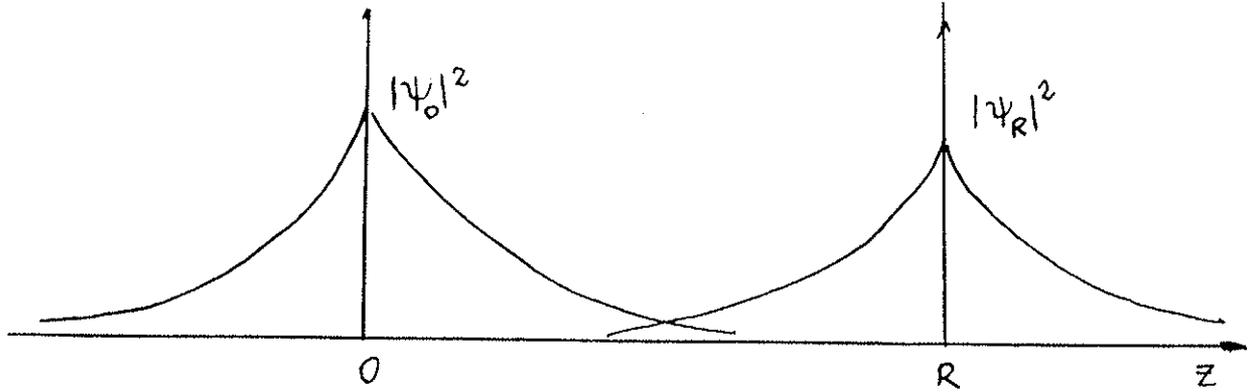


Figura E.2: Densidades de probabilidades de encontrar elétrons ligados a duas impurezas, ao longo da reta definida pelas impurezas.

A energia de polarização fica então sendo

$$U_{pol}(R) = E(0, \infty) - E(b, R) \quad (\text{E.40})$$

$$\approx \frac{3}{4} \frac{e^2}{KR} \left( \frac{a^*}{R} \right)^3 \quad (\text{E.41})$$

Da relação (E.1) obtemos finalmente

$$U_{pol}(R) \approx \frac{e^2}{K} N_D a^{*3} . \quad (\text{E.42})$$

Calculemos agora a superposição das funções de onda de dois elétrons ligados a duas impurezas doadoras, distantes  $R$  uma da outra. Suponhamos que os elétrons estejam no estado fundamental ( $1s$ ). A figura (E.2) representa a probabilidade de se encontrar cada um dos elétrons ligados às impurezas.

Se as impurezas localizam-se em  $(0,0,0)$  e  $(0,0,R)$  temos que a superposição quântica (quantum overlap) é dada pela convolução

$$S(R) = \int \psi(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3\mathbf{r} . \quad (\text{E.43})$$

Este cálculo pode ser feito via *Transformada de Fourier*. A Transformada de Fourier da função  $S(\mathbf{R})$  é dada por

$$S(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{R} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} S(\mathbf{R}), \quad (\text{E.44})$$

que, reescrita em termos das transformadas das funções de onda torna-se

$$S(\mathbf{k}) = |\psi(\mathbf{k})|^2. \quad (\text{E.45})$$

Mas [Gr 80],

$$\psi(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{E.46})$$

$$= \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C e^{-r/a^*} \quad (\text{E.47})$$

$$= \frac{4\pi C}{a^*} \int_0^\infty r e^{-r/a^*} \sin(kr) dr \quad (\text{E.48})$$

$$= \frac{8\pi C}{a^*} \frac{1}{\frac{1}{a^{*2}} + k^2}, \quad (\text{E.49})$$

com  $C$  dado pela equação (E.8).

Dessa forma obtemos  $S(\mathbf{k})$

$$S(\mathbf{k}) = \left(\frac{8\pi C}{a^*}\right)^2 \left(\frac{1}{\frac{1}{a^{*2}} + k^2}\right)^2 \quad (\text{E.50})$$

e podemos calcular sua anti-transformada

$$S(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} S(\mathbf{k}) \quad (\text{E.51})$$

$$= -\frac{16C^2}{Ra^{*2}} \frac{d}{dR} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikR}}{\left(\frac{1}{a^{*2}} + k^2\right)^4} dk. \quad (\text{E.52})$$

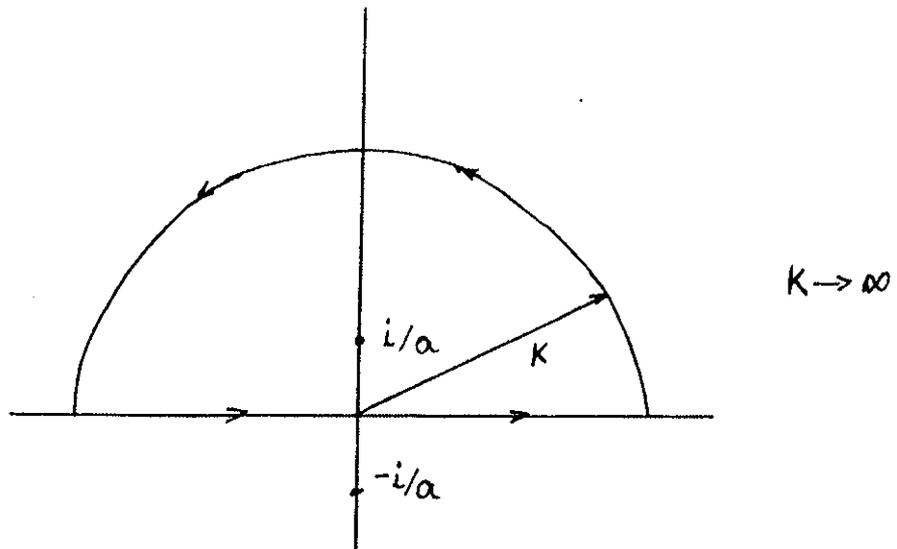


Figura E.3: Caminho de integração no plano de Argand-Gauss, para o cálculo de  $S(\mathbf{R})$

Esta última integral pode ser calculada através de uma integral no plano de Argand-Gauss, através do caminho representado na figura (E.3), ou seja,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikR}}{\left(\frac{1}{a^{*2}} + k^2\right)^4} dk = \oint \frac{e^{izR}}{\left(z - \frac{i}{a^*}\right)^4 \left(z + \frac{i}{a^*}\right)^4} dz \quad (\text{E.53})$$

Observe na figura (E.3) que a função

$$g(z) = \frac{e^{izR}}{\left(z^2 + \frac{1}{a^{*2}}\right)^4} \quad (\text{E.54})$$

apresenta dois polos de ordem 4 situados em

$$z = \pm \frac{i}{a^*} \quad (\text{E.55})$$

e que

$$g(z) \longrightarrow 0 \quad (\text{E.56})$$

no semi-círculo de raio  $K$ , quando

$$k \longrightarrow \infty . \quad (\text{E.57})$$

Chamando-se

$$f(z) = \frac{e^{izR}}{\left(z + \frac{i}{a^*}\right)^4}, \quad (\text{E.58})$$

temos, de acordo com a fórmula integral de Cauchy, que

$$\oint g(z)dz = \oint \frac{f(z)}{\left(z - \frac{i}{a^*}\right)^4} dz \quad (\text{E.59})$$

$$= \frac{2\pi i}{3} \frac{d^3 f}{dz^3} \left(\frac{i}{a^*}\right) \quad (\text{E.60})$$

$$= \frac{\pi a^{*4}}{48} e^{-R/a^*} \left\{ R^3 + 6a^* R^2 + 15a^{*2} R + 15a^{*3} \right\} . \quad (\text{E.61})$$

Voltando à equação (E.52), temos

$$S(\mathbf{R}) = -\frac{R}{a^*} e^{-R/a^*} \left\{ 1 + 4\frac{a^*}{R} + 5\left(\frac{a^*}{R}\right)^2 \right\} \quad (\text{E.62})$$

$$\approx -\frac{R}{a^*} e^{-R/a^*} . \quad (\text{E.63})$$

Sendo  $R$  igual à distância média entre as impurezas

$$R = N_D^{-1/3} \quad (\text{E.64})$$

temos

$$S(\mathbf{R}) \approx -\frac{1}{N_D^{1/3} a^*} e^{-(N_D^{1/3} a^*)^{-1}} \quad (\text{E.65})$$

Para baixas concentrações de impurezas temos a condição (4.4) e portanto a superposição quântica torna-se desprezível.

## Apêndice F

### Integrais usadas no cálculo variacional com campo magnético nulo

O cálculo variacional, em linhas gerais, é simples. Temos que calcular o valor esperado do hamiltoniano usando uma função de onda parametrizada e, em seguida, variar os parâmetros variacionais até que o valor esperado se torne estacionário, sempre mantendo a função de onda normalizada, vide (D). O problema é que o cálculo das integrais geralmente é muito trabalhoso, aumentando a complexidade à medida que tomamos níveis mais excitados, pois as funções de onda destes estados têm que conter superfícies nodais (lugar geométrico dos pontos onde a função de onda se anula). Escrevemos geralmente estas funções de onda como um produto de uma função sem nodos por um polinômio, vide capítulo (2) e apêndice (C).

Para o elétron ligado a uma impureza doadora rasa em um poço quântico, na ausência de uma campo magnético, as funções de onda são dadas por (2.44), (2.45) e (2.46). Temos então que calcular integrais do seguinte tipo:

$$G_{mn}^i(\gamma) = 2\pi \int_{-L/2}^{L/2} dz f^i(z) a^m \int_0^\infty e^{-\gamma u} u^{n-1} \rho d\rho, \quad (\text{F.1})$$

com  $n$  ímpar;  $m, n \geq 0$ ,

$$a = z - z_i, \quad (\text{F.2})$$

$$u = \sqrt{\rho^2 + a^2}, \quad (\text{F.3})$$

com  $i = c, s$  e

$$f^c(z) = \cos^2(\beta z) \quad (\text{F.4})$$

$$= (1/2) \sum_{l=1}^2 \cos(\beta_l z) \quad (\text{F.5})$$

$$= (1/2) \sum_{l=1}^2 g^c(\beta_l z) \quad (\text{F.6})$$

$$f^s(z) = \sin(\beta z) \cos(\beta z) \quad (\text{F.7})$$

$$= (1/2) \sum_{l=1}^2 \sin(\beta_l z) \quad (\text{F.8})$$

$$= (1/2) \sum_{l=1}^2 g^s(\beta_l z), \quad (\text{F.9})$$

com

$$\beta_1 = 0 \quad (\text{F.10})$$

$$\beta_2 = 2\beta \quad (\text{F.11})$$

$$\beta = \frac{\pi}{L}. \quad (\text{F.12})$$

Substituindo-se  $\rho$  por  $u$  na integral (F.1), obtemos:

$$G_{mn}^i(\gamma) = 2\pi \int_{-L/2}^{L/2} dz f^i(z) a^m \int_{|a|}^{\infty} e^{-\gamma u} u^n du \quad (\text{F.13})$$

Estas integrais podem ser escritas como

$$G_{mn}^i(\gamma) = \pi \sum_{l=1}^2 \int_{-L/2}^{L/2} g^i(\beta_l z) a^m \int_{|a|}^{\infty} u^n e^{-\gamma u} du, \quad (\text{F.14})$$

A integral sobre a variável  $u$  é facilmente obtida:

$$\int_{|a|}^{\infty} u^n e^{-\gamma u} du = \frac{e^{-\gamma|a|}}{\gamma} \sum_{s=0}^n \frac{n! |a|^{n-s}}{(n-s)! \gamma^s}, \quad (\text{F.15})$$

Substituindo este resultado na integral acima obtemos

$$G_{mn}^i(\gamma) = \pi \sum_{l=1}^2 \sum_{s=0}^n \frac{n!}{(n-s)! \gamma^{s+1}} I_{j_m \alpha_s}^i(\beta_l, -\gamma), \quad (\text{F.16})$$

onde  $j_m$  é 0 ou 1 para  $m$  par ou ímpar respectivamente ,

$$\alpha_s = n - s + m - j_m, \quad (\text{F.17})$$

$$I_{j\alpha}^i(\beta, \gamma) = \int_{-L/2}^{L/2} g^i(\beta z) a^j |a|^\alpha e^{\gamma|a|} dz. \quad (\text{F.18})$$

Tendo em vista a presença de  $|z - z_i|$  na última integral, temos que calculala em duas partes de limites  $(-L/2, z_i)$  e  $(z_i, L/2)$ . Usando a expansão polinomial podemos escrever:

$$\begin{aligned} I_{j\alpha}^i(\beta, \gamma) &= \sum_{p=0}^{j+\alpha} \frac{(j+\alpha)!}{(j+\alpha-p)! p!} (-z_i)^{-p} \times \\ &\quad \left( (-1)^\alpha e^{\gamma z_i} \int_{-L/2}^{z_i} g^i(\beta z) e^{-\gamma z} z^{\alpha+j-p} dz + \right. \\ &\quad \left. e^{-\gamma z_i} \int_{z_i}^{L/2} g^i(\beta z) e^{\gamma z} z^{\alpha+j-p} dz \right). \end{aligned} \quad (\text{F.19})$$

Finalmente temos que calcular integrais do tipo

$$J_q^i(\beta, \eta; z) = \int g^i(\beta z) e^{\eta z} z^q dz, \quad (\text{F.20})$$

que é a parte real ou imaginária da integral

$$\int e^{\zeta z} z^q dz = e^{\zeta z} P_q(\zeta; z), \quad (\text{F.21})$$

com

$$\zeta = i\beta + \gamma, \quad (\text{F.22})$$

e

$$P_q(\gamma; z) = \frac{q!}{\chi} \sum_{p=0}^q \frac{z^{q-p} (-1)^p \zeta^{*p+1}}{\chi^p (q-p)!}, \quad (\text{F.23})$$

onde

$$\chi = |\zeta|^2 . \quad (\text{F.24})$$

Temos então

$$G_{mn}^i(\gamma) = \pi \sum_{l=1}^2 \sum_{s=0}^n \frac{n!}{(n-s)! \gamma^{s+1}} \sum_{p=0}^{n+m-s} \frac{(n+m-s)! (-z_i)^p}{(n+m-s-p)! p!} \times \\ \left( (-1)^{n+m-j_m-s} e^{-\gamma z_i} J_{n+m-p-s}^i(\beta_l, \gamma; z) \right)_{-L/2}^{z_i} + \\ e^{\gamma z_i} J_{n+m-p-s}^i(\beta_l, -\gamma; z) \Big|_{z_i}^{L/2} \quad (\text{F.25})$$

onde

$$J_k^i(\beta, \gamma; z) \Big|_{z_1}^{z_2} = J_k^i(\beta, \gamma; z_2) - J_k^i(\beta, \gamma; z_1) . \quad (\text{F.26})$$

Apesar da forma um tanto complexa da expressão (F.25), ela pode ser obtida muito facilmente através de um cálculo computacional e portanto o cálculo dos elementos de matriz envolvendo as funções variacionais fica simples de ser calculado. Para ilustrar este método mostramos os resultados de cálculos com os estados  $1s$  e  $2p_{\pm}$ .

$$\int |\Psi_{1s}|^2 dV = \pi |A_{1s}|^2 G_{01}^c(2\alpha) , \quad (\text{F.27})$$

$$\int \Psi_{1s}^* H \Psi_{1s} dV = \pi |A_{1s}|^2 \{ (2\alpha - 2) G_{00}^c(2\alpha) \\ - (\alpha^2 - \beta^2) G_{01}^c(2\alpha) - 2\alpha\beta G_{10}^s(2\alpha) \} , \quad (\text{F.28})$$

onde  $\alpha$  é o parâmetro variacional da função  $\psi_{1s}$ .

$$\int |\Psi_{2p_{\pm}}|^2 dV = \pi |A_{2p}|^2 \{ G_{03}^c(2\gamma) - G_{01}^c(2\gamma) \} , \quad (\text{F.29})$$

$$\int \Psi_{2p_{\pm}}^* H \Psi_{2p_{\pm}} dV = \pi |A_{2p}|^2 \left( (\beta^2 - \gamma^2) (G_{03}^c(2\gamma) - G_{21}^c(2\gamma)) + \right. \\ \left. (4\gamma - 2) (G_{02}^c(2\gamma) - G_{20}^c(2\gamma)) + 2\gamma\beta (G_{30}^s(2\gamma) - G_{12}^s(2\gamma)) \right) \quad (\text{F.30})$$

onde  $\gamma$  é o parâmetro variacional da função  $\psi_{2p_{\pm}}$ .

## Apêndice G

### Artigos publicados

## Macroscopic effect of the compensation on the binding energy of an electron bound to a donor in an $n$ -type quantum well

B. C. F. Colchesqui

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 01 498 São Paulo, São Paulo, Brazil*

P. D. Emmel

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 01 498 São Paulo, São Paulo, Brazil  
and Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Física, 13 560 São Carlos, São Paulo, Brazil*

E. A. de Andrada e Silva and I. C. da Cunha Lima

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 01 498 São Paulo, São Paulo, Brazil  
and Instituto de Pesquisas Espaciais, 12 201 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*

(Received 10 July 1989)

The joint density of states for the transition 1s to the first subband of an electron bound to a donor impurity in a compensated  $n$ -type quantum well is calculated in a semiclassical model which is valid in the low-concentration regime. A macroscopic electrostatic potential due to charged particles is obtained and its effect on the transition is analyzed.

Recently two of us (E.A.A.S. and I.C.C.L.) calculated the impurity-electron density of states (DOS) and the on-site electric field distribution on donors inside an  $n$ -type quantum well (QW) using a Monte Carlo simulation.<sup>1</sup> We have obtained, among other results, the average density of neutral donors inside the QW (Fig. 9 in Ref. 1) which appears as a result of the compensation by acceptor impurities. In those calculations we have used a semiclassical model in such a way that ionized impurities interact among each other as point charges. These interactions, summed up with the confining potential of the QW, were taken into account both in the DOS and in the density of neutral donors. A question, however, might be raised: since there is an electric charge distribution inside the well due to the complete ionization of acceptors and partial ionization of donors (the compensation is  $k = N_A/N_D < 1$ ), an additional potential (macroscopic) appears inside the QW. What is its effect, alone, on the energy of the bound electron and on the edge of the first subband? In the present work we answer this question using a very simple model. We assume a collection of  $N_D$  donor impurities and  $N_A$  acceptors inside the QW. The energy of an electron bound to a donor was first calculated by Bastard<sup>2</sup> and his approach has been improved in subsequent works.<sup>3-5</sup> This energy depends on  $z_i$  (distance to the center of the QW in the growth direction) increasing as we approach the interfaces with the wider gap material. We neglect the overlap between the wave functions of electrons bound to different donors. Furthermore, we neglect microscopic interaction between point

charges, contrary to Ref. 1. Our impurities are then isolated ones except by the macroscopic field introduced by charge distribution. This field will have, then, only the  $z$  component. Since all acceptors are ionized, we have, inside the well, a constant density of negative charge:

$$\rho_-(z) = -\frac{keN_D}{L}, \quad (1)$$

where  $L$  is the well width. Since the deeper inside the well the lower the energy of the bound state is, the neutral donors will occupy the central region of the well. Due to charge neutrality, the density of positive charges is

$$\rho_+(z) = \frac{eN_D}{L} \Theta(|z| - z_m), \quad (2)$$

where

$$z_m = \frac{L}{2}(1-k) \quad (3)$$

is the half-width of the distribution of the neutral donors charge. Of course this  $\rho_+(z)$  differs from the corresponding one resulting from Fig. 9 in Ref. 1 where disorder in the neighborhood of each impurity site has been taken into account in the Monte Carlo simulation. Poisson's equation can now be integrated to yield the electrostatic potential

$$\phi(z) = \frac{2\pi N_D}{\kappa L} [ -(|z| - z_m)^2 \Theta(|z| - z_m) + kz^2 ], \quad (4)$$

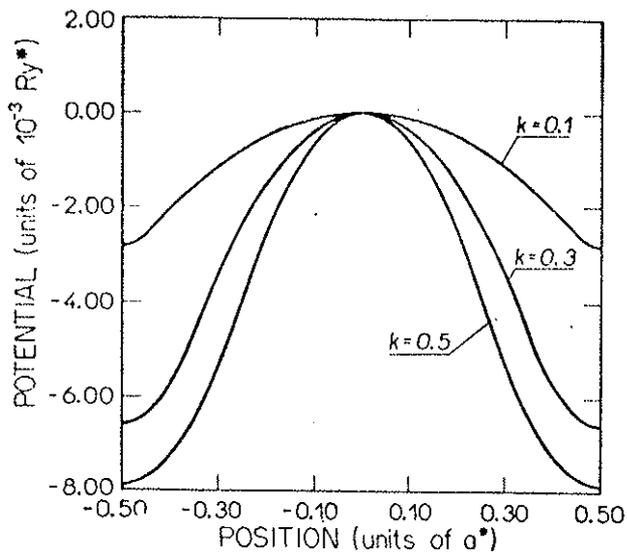


FIG. 1. Electrostatic potential energy due to charge distribution for  $N_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 1a^*$ , and  $k = 0.1, 0.3, 0.5$ .

where  $\kappa$  is the dielectric constant of the QW. The compensation macroscopically introduces the potential  $-e\phi(z)$  in addition to the confining potential. In Fig. 1 we see the electrostatic potential energy  $[-e\phi(z)]$  for  $N_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 1a^*$  (effective Bohr radius), and several values of  $k$ . The energy is given in effective Rydbergs. We note that the maximum variation of this potential is quite small compared with the energy of the first subband which is  $\pi^2/L^2$ . This electrostatic potential tends to move the electrons closer to the interfaces. In order to obtain the ground state for the bound electron and the edge of the first subband we have multiplied the unperturbed wave functions by the envelope function:

$$F_\alpha(z) = 2 - \cos(\alpha z), \quad (5)$$

introducing a second variation parameter,  $\alpha$ . That choice of  $F_\alpha(z)$  is actually as effective as  $\exp(\alpha^2 z^2/2)$  but is much easier to handle in calculation. Then we have, accordingly,

$$\phi_b(z) = F_\alpha(z) \cos\left[\frac{\pi z}{L}\right] e^{-bu}, \quad (6)$$

where

$$u = [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}$$

and

TABLE I. Variation of  $\Delta E_{\text{subband}}^{\text{edge}}$  ( $\text{Ry}^*$ ) with  $k$  and  $L$  ( $a^*$ ).

$k \backslash L$	1	2	4
0.1	$-4.11 \times 10^{-4}$	$-8.21 \times 10^{-4}$	$-1.64 \times 10^{-3}$
0.3	$-1.22 \times 10^{-3}$	$-2.44 \times 10^{-3}$	$-4.88 \times 10^{-3}$
0.5	$-1.90 \times 10^{-3}$	$-3.80 \times 10^{-3}$	$-7.60 \times 10^{-3}$

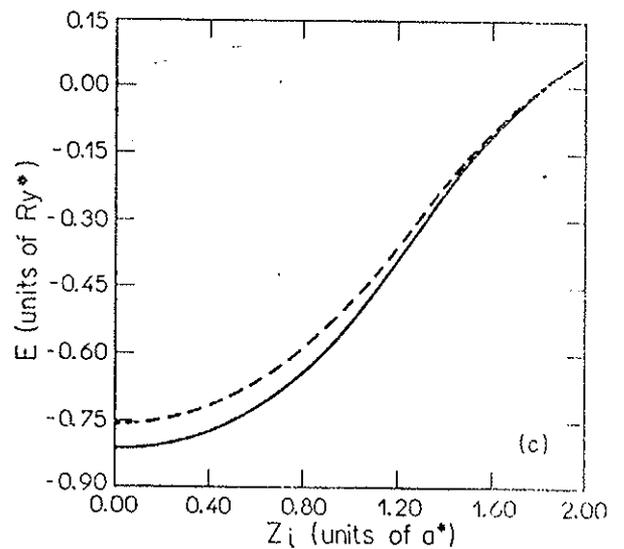
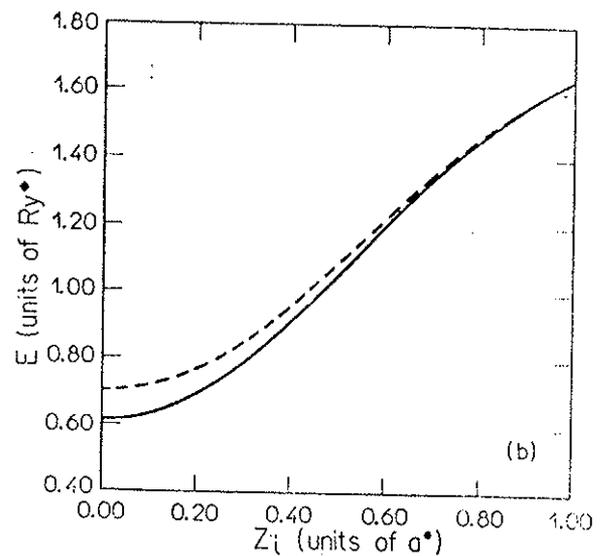
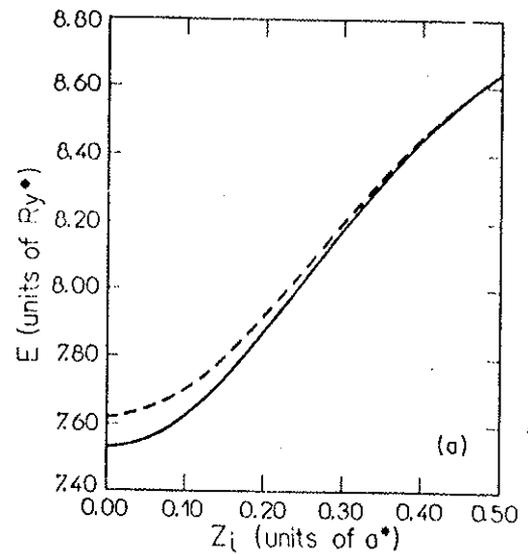


FIG. 2. Binding energy for  $N_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 1a^*, 2a^*$ , and  $4a^*$ . Dashed line, using Bastard's wave function; solid line, our results.

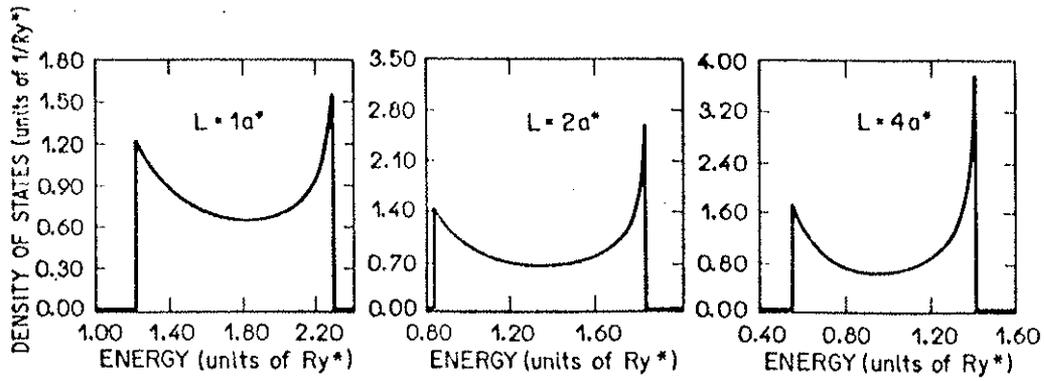


FIG. 3. Joint density of states for the transition  $E_0 \rightarrow E_{\text{subband}}^{\text{edge}}$  for  $N_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $L = 1a^*$ ,  $2a^*$ , and  $4a^*$  and  $k = 0.3$ .

$$\phi_s(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} F_a(z) \cos\left[\frac{\pi z}{L}\right]. \quad (7)$$

In the above expressions, the indices  $b$  and  $s$  stand for bound and subband states, respectively.

We have calculated the energy of the first bound  $E_0$  state variationally according to the function in Eq. (6) for  $L = 1a^*$ ,  $2a^*$ , and  $4a^*$ . The results are shown in Fig. 2. The dashed lines represent the energies obtained with Bastard's wave function. The solid lines represent our results. No significant differences appear among lines corresponding to different compensations, the maximum deviation being of the order of 20%. The difference between the dashed and solid lines occurs due to the choice of the function (two parameters in our case). In Table I we show the variation  $\Delta E_{\text{subband}}^{\text{edge}}$  with  $k$  and  $L$  for  $N_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . This variation increases with  $L$  but is of

the order of  $10^{-3} \text{ Ry}^*$ . Finally, in Fig. 3 we show a typical joint density of states for  $k = 0.3$  and  $L = 1a^*$ ,  $2a^*$ , and  $4a^*$  corresponding to the intrapurity transition  $E_0 \rightarrow E_{\text{subband}}^{\text{edge}}$ .

As a conclusion, we can say that the macroscopic electrostatic potential introduced by the compensation does not affect significantly the transition  $E_0 \rightarrow E_{\text{subband}}^{\text{edge}}$  in the low-impurity-concentration regime in which the present treatment applies. So, the effect of the compensation on the DOS observed in Ref. 1 is due to fluctuations of the local potential at the impurity sites. The present calculation confirms the set of energies obtained in Ref. 1 as the proper choice to be considered as the starting point to obtain optical properties related with the impurity states in the QW in the low-concentration regime for any compensation whatsoever.

<sup>1</sup>E. A. de Andrada e Silva and I. C. da Cunha Lima, Phys. Rev. B 39, 10 101 (1989).

<sup>2</sup>G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).

<sup>3</sup>C. Mailhoit, Yia-Chung Chang, and T. C. McGill, Phys. Rev. B 26, 4449 (1982).

<sup>4</sup>R. L. Greene and K. K. Bajaj, Solid State Commun. 45, 825 (1983).

<sup>5</sup>J. A. Brum, G. Bastard, and C. Guillemot, Phys. Rev. B 30, 905 (1984).

## Lightly doped and compensated quantum wells: The density of states in the dipole model

P. D. Emmel

*Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), Caixa Postal 676,  
13 560 São Carlos, São Paulo, Brazil**and Instituto de Física da Universidade de São Paulo (USP), Caixa Postal 20 516, 01 498 São Paulo, São Paulo, Brazil*

E. A. de Andrada e Silva and J. C. da Cunha Lima

*Instituto de Pesquisas Espaciais (INPE), Caixa Postal 515, 12 201 São José dos Campos, São Paulo, Brazil  
and Instituto de Física da Universidade de São Paulo (USP), Caixa Postal 20 516, 01 498 São Paulo, São Paulo, Brazil*

(Received 21 July 1988)

We present a calculation of the density of states (DOS) of electrons bound to donor impurities in a lightly doped and compensated quantum well. We use a quasiclassical treatment suitable for low compensation in which we apply the dipole model. If the full electron-electron Coulomb interactions were taken into account, instead of the short-range dipole interaction, a Coulomb gap should appear around the Fermi level. But this model is able to describe the small peak of unoccupied states that appear, as a result of compensation, in the high-energy side of the DOS. In this work we show how the additional peak varies with the well width, impurity concentration, and compensation in the small-impurity-concentration limit.

It is well established by now that a gap in the density of states (DOS) occurs at the Fermi level in a lightly doped and compensated semiconductor. In the past Efros, Van Lien, and Shklovskii<sup>1</sup> have calculated the DOS, using a numerical simulation method due to Baranovskii *et al.*<sup>2</sup> to obtain the ground state of this system, in the so-called classical impurity band model. In fact, when the impurity concentration is very small the electrons are in the completely localized regime. The overlap of the wave functions representing the one-electron ground state is negligible as the average distance between impurities is much greater than the localization length. In that case the donors and acceptors can be assumed as point charges.<sup>3</sup>

At sufficiently low temperatures all acceptors are ionized. If  $n_i$  represents the occupancy of a donor  $i$ ,  $r_{i\mu}$  stands for the distance between that donor and an acceptor  $\mu$ ; the system can be described by the classical Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{kr_{ij}} (1-n_i)(1-n_j) - \sum_{i,\nu} \frac{e^2}{kr_{i\nu}} (1-n_i) + \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \frac{e^2}{kr_{\mu\nu}} \quad (1)$$

For low compensation the ionized donors are those near an acceptor, resulting in unoccupied electron states with higher energies than those occupied at neutral donors.

It turns out that a simple way to treat that problem analytically is the dipole model: each acceptor ionizes its nearest-neighbor donor and the pair does not perturb the states of neutral donors as its potential rapidly decays. A bandwidth appears in this additional peak at the DOS located at  $e^2/kr$ , where  $r$  is the distance between atoms in the pair, corresponding to the unoccupied "dipole states." The spread in energy is due to randomness in the dipole moment. Using this simplified picture, a two-

peaked DOS comes out: a deltalike peak due to states in neutral donors and a separated broad peak of the unoccupied states in the donors forming dipoles with ionized acceptors. Actually, fluctuations of the electrostatic potential at the neutral donors are responsible for a considerable broadening of the delta peak. However the DOS does not change qualitatively and indeed the dipole model was shown<sup>4</sup> to give very good results in the calculation of the electric field distribution.

In this work we extend the dipole model to treat a lightly doped and compensated semiconductor heterostructure: the  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  quantum well (QW). We assume that hydrogenlike donor and acceptor impurities occur in the small gap layer of GaAs. The impurity concentration is allowed to vary along the QW according to a normalized profile  $P(Z_i)$ , where  $Z_i$  is the distance to the center of the well. We assume, per unit volume,  $N_D$  donor impurities, and  $N_A = KN_D$  acceptors— $K$  is the compensation—in the QW of width  $L$  and define the effective two-dimensional concentration  $n_D = N_D L$ .

The single-impurity problem has been treated variationally by Bastard.<sup>5</sup> His calculations, although they have been subsequently extended to include several improvements, present the right qualitative behavior and are accurate within 10%. In a way, we can express the ground-state energy of an electron bound to a shallow isolated donor as

$$E(Z_i; L) = a(L)Z_i^4 + b(L)Z_i^2 + c(L), \quad (2)$$

where we have fitted Bastard's results with a fourth-order polynomial. If we measure (as we do hereafter) the energies in effective rydbergs and distances in the effective Bohr radius ( $1\text{Ry}^* \approx 5.8 \text{ meV}$  and  $a_0^* \approx 100 \text{ \AA}$  for GaAs, respectively) we obtain the parameters shown in Table I, where we have made  $E(0; L) = 0$ . So for low concentration and uncompensated samples, the DOS becomes

TABLE I. Coefficients of the fourth-order polynomial adjusted to fit Bastard's eigenvalues of the isolated-impurity problem in the QW. Units are so that, if  $Z_i$  is computed in units of  $a_0^*$ , Eq. (2), with the above coefficients, gives the energy in  $\text{Ry}^*$  [ $C(L) \rightarrow 0$ ].

	$L=1$	2	3	4	$(a_0^*)$
$a$	-14.26	-0.788	-0.128	-0.030	
$b$	7.506	1.706	0.676	0.336	

$$D_L(\epsilon) = \eta_D \int P(Z_i) \delta(\epsilon - E(Z_i; L)) dZ_i, \quad (3)$$

In the case of uniform distribution inside the well,  $P(Z_i) = L^{-1}$ , and using Eq. (2) we obtain

$$D_L(\epsilon) = \eta_D (|a_L|/2b_L^3)^{1/2} \{ [1 - f_L(\epsilon)^{1/2}] f_L(\epsilon) \}^{1/2}, \quad (4)$$

with

$$f_L(\epsilon) = 1 - 4|a_L| |\epsilon/b_L^2|, \quad (4a)$$

where  $a_L = a(L)$  and so on. Observe that Eq. (4) diverges at  $\epsilon=0$  what is due to the minimum at this energy. The structure of this DOS has already been extensively discussed.<sup>5-7</sup>

Let us assume now that the impurities (both donors and acceptors) are distributed only within a thin layer around  $Z_i$  of width  $\Delta$  inside the well and in such a concentration that  $\Delta \ll L \ll R_0$ , where  $R_0$  is the average separation between impurities. Then each donor-acceptor pair in the QW contributes to the DOS with energy  $E(Z_i; L) + 2/r$  giving origin to the upper branch of the DOS. So,

$$D(\epsilon; Z_i) = (1-K)D^{(1)}(\epsilon - E(Z_i; L)) + KD^{(2)}(\epsilon - E(Z_i; L)), \quad (5)$$

with

$$D^{(1)}(w) = \eta_D \delta(w) \quad (5a)$$

and

$$D^{(2)}(w) = \eta_D \int p(r) \delta \left( w - \frac{2}{r} \right) dr, \quad (5b)$$

where now  $\eta_D = N_D \Delta$  and  $p(r)$  is the probability for the donor pairs to be separated by a distance  $r$  and is given by the Poisson distribution

$$p(r) = 2\pi r \eta_D e^{-\pi r^2 \eta_D}. \quad (6)$$

The above two-dimensional limit approximation cannot be used if  $\Delta \lesssim L$  and the problem then becomes much more complicated. Some of us<sup>7,8</sup> have treated this case in a more severe circumstance, namely, for intermediate concentration, when the overlap between the electrons wave functions cannot be neglected. We have shown<sup>8</sup> in that case that the transfer matrix, or the hopping, between impurity sites  $i$  and  $j$  is not very sensitive to the positions  $Z_i$  and  $Z_j$  up to an impurity layer width of the order of  $L/2$ . Then, we could consider for the DOS the approximated following expression:

$$D(\epsilon) = \int \Gamma(Z_i) D(\epsilon; Z_i) dZ_i, \quad (7)$$

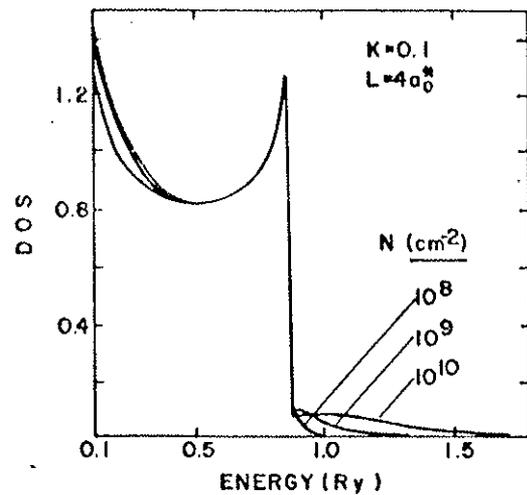


FIG. 1. Density of states (DOS) per donor as calculated by Eq. (8) for the concentrations (a)  $10^8 \text{ cm}^{-2}$ , (b)  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ , and (c)  $10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . We used  $L = 4a_0^*$  and compensation  $K = 0.1$ .

where  $D(\epsilon; Z_i)$  is the DOS calculated as if all impurities were located at  $Z_i$ . To follow this reasoning in the case of lightly doped QW's one must treat the dipole energy  $2/r_{ij}$  as was done for the hopping. Fortunately it turns out that in this case the above approximation [Eq. (7)] is much better. In fact, within our precision ( $10^{-4} \text{ Ry}^*$ ),  $2/r_{ij}$  does not change with  $|Z_i - Z_j|$  because we are always considering situations so that  $\eta_D^{-1/2} \gg L$ .

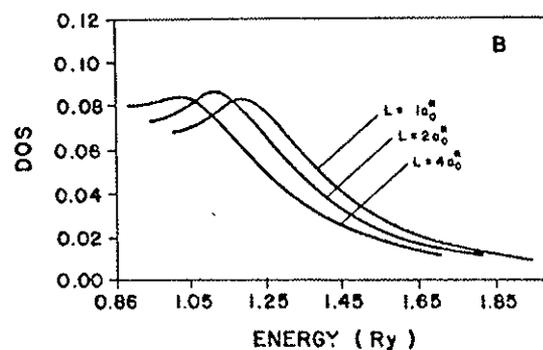
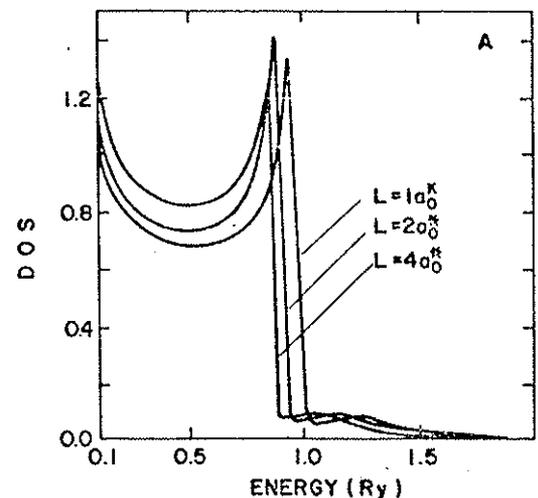


FIG. 2. The DOS now for different well widths  $L$  (a). In this case  $\eta_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  and  $K = 0.1$ . (b) shows detail of the extra peak of empty dipole states.

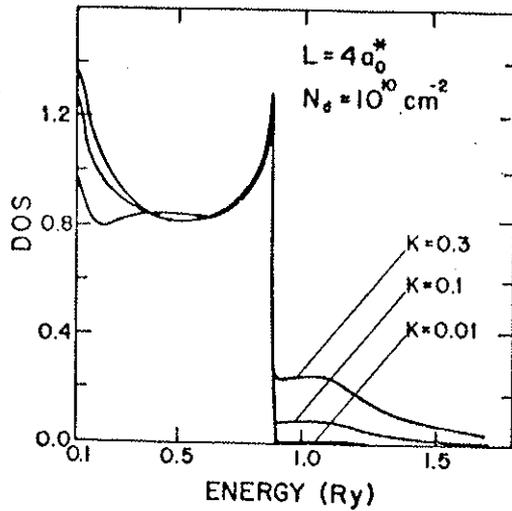


FIG. 3. Results of the DOS [Eq. (8)] for the compensations  $K = 0.1, 0.1,$  and  $0.3$  with  $L = 4a_0^*$  and  $\eta_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ .

Then, we can approximate the total DOS for the lightly doped and compensated QW with the following two branches:

$$D_L(\epsilon) = (1-K)D_L^{(1)}(\epsilon) + KD_L^{(2)}(\epsilon) \\ = \int P(Z_i)D(\epsilon; Z_i)dZ_i, \quad (8)$$

where  $D(\epsilon; Z_i)$  is the one given by Eq. (5),  $D_L^{(1)}(\epsilon)$  by Eq. (3) and

$$D_L^{(2)}(\epsilon) = \eta_D \int dZ_i P(Z_i) \int P(r) \delta(\epsilon - E(Z_i; L) - 2/r) dr. \quad (9)$$

For the uniform distribution  $P(Z_i) = L^{-1}$ ,  $D_L^{(1)}$  is given by Eq. (4) and

$$D_L^{(2)}(\epsilon) = \frac{2\pi\eta_D^2}{L} \int_0^{L/2} \exp \left[ -\pi\eta_D \left( \frac{2}{\epsilon - E(Z_i; L)} \right)^2 \right] \\ \times \left[ \frac{2}{\epsilon - E(Z_i; L)} \right]^3 \\ \times \Theta(\epsilon - E(Z_i; L)) dZ_i. \quad (10)$$

Figures 1–3 show the calculated total DOS [Eq. (8)]

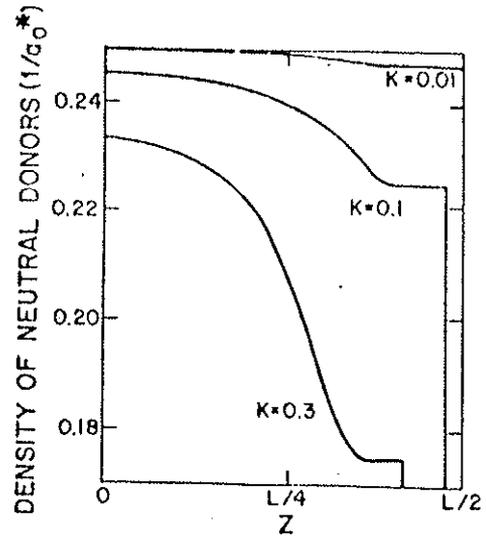


FIG. 4. Distribution of neutral donors inside the quantum well as varying with the compensation. The well width used was  $L = 4a_0^*$  and  $\eta_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ .

for several impurity concentrations, well widths, and compensations, respectively. We have assumed in all situations a uniform profile. All the DOS are normalized to 1. We can see that the principal effect of a small compensation on an  $n$ -type doped QW as revealed by the above calculations, is the formation of a small broad peak at higher energies.

It is important to observe that the energy in the dipole states which is in the average  $2\eta_D^{1/2}$  above that of the neutral impurity is, at the maximum, of the order of  $0.1 \text{ Ry}^*$ . This is quite small as compared with the spread in energy only due to the randomness in  $Z_i$  (independent in the compensation) which is itself of the order of  $1 \text{ Ry}^*$ . Due to this fact, most of the second branch of the DOS overlaps with the first one, meaning that some dipole states will be occupied, preferably near the center of the well (as shown in Fig. 4) and then isolated point charges will occur. The peak corresponding to unoccupied dipole states is expected to be well described in our calculations. The peak should be observed in experiments at very low temperatures and its maximum occurs at  $1.04$  and  $0.87 \text{ meV}$  separated from the nearest-neighbor peak for  $L = 1a_0^*$  and  $4a_0^*$ , respectively, with  $n_D = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  and  $K = 0.1$ .

<sup>1</sup>A. L. Efros, N. Van Lien, and B. I. Shklovskii, *J. Phys. C* **12**, 1869 (1979).

<sup>2</sup>S. D. Baranovskii, A. L. Efros, B. L. Gelmont, and B. I. Shklovskii, *J. Phys. C* **12**, 1023 (1979).

<sup>3</sup>A more detailed description of the model can be found in the review of B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **14**, 825 (1980) [*Sov. Phys.—Semicond.* **14**, 487 (1980)].

<sup>4</sup>Sh.M. Kogan, N. Van Lien, and B. I. Shklovskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **78**, 1933 (1980) [*Sov. Phys.—JETP* **51**, 971 (1980)].

<sup>5</sup>G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981).

<sup>6</sup>T. Duffield *et al.*, *Solid State Commun.* **60**, 557 (1986).

<sup>7</sup>E. A. de Andrada e Silva and I. C. da Cunha Lima, *Solid State Commun.* **64**, 113 (1987).

<sup>8</sup>E. A. de Andrada e Silva, I. C. da Cunha Lima, A. Ferreira da Silva, and C. E. Leal, *Phys. Rev. B* **37**, 8228 (1988).

## Infrared-absorption coefficient for shallow donors in a quantum well

P. D. Emmel

*Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, via Washington Luiz km 235,  
13560 São Carlos, São Paulo, Brazil*  
and *Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20516, 01498  
São Paulo, São Paulo, Brazil*

J. R. Leite

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20516, 01498  
São Paulo, São Paulo, Brazil*

I. C. da Cunha Lima

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20516, 01498  
São Paulo, São Paulo, Brazil*  
and *Instituto de Pesquisas Espaciais, Caixa Postal 515, 12201 São José dos Campos,  
São Paulo, Brazil*

(Received 5 July 1990; revised manuscript received 26 November 1990)

We present a calculation of the absorption coefficient for the intrainpurity transitions between the first hydrogenlike donor states ( $n \leq 3$ ) existing in a quantum well (QW) of finite width, for uniform, Gaussian-, and  $\delta$ -like dopings. The eigenstates are obtained using a variational formulation with Slater-type functions. In this way we obtain the states  $1s$ ,  $2s$ ,  $3s$ ,  $3p_{\pm}$ , and  $3d2_{\pm}$ . The obtained wave functions allow us to calculate the oscillator strengths of the transitions, resulting in the absorption coefficient, which is in good agreement with the experimental values available in the literature.

$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  quantum wells (QW's) are presently a popular system to study transport and optical properties of a quasi-two-dimensional (quasi-2D) electron gas. They are generated by several techniques by growing a layer of GaAs (narrow-gap region) between two layers of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  (wide-gap regions). For the undoped case, defined here as the absence of impurities in the GaAs, the electron in that region is confined by a potential barrier at the interfaces but is, nevertheless, free to move in the plane normal to the growing direction.

During the growth process donors and acceptors can be made to occur either inside or outside the GaAs layer in a very well controlled way. For a single donor impurity inside the well, an additional bound electron state appears below the first subband of the quasi-2D electron gas. That state is a hydrogenlike one, as in bulk semiconductors, perturbed by the confining potential in the  $z$  direction. This break in symmetry makes the binding energy depend on the  $z$  position of the impurity. In the low impurity concentration limit, the so-called dilute case, those bound states are important in determining the infrared properties of the heterostructures. These states have been extensively studied experimentally by Shanabrook and co-workers.<sup>1,2</sup>

On the other hand, the calculation of the energy levels of an electron bound to an impurity in a quantum well has been performed by many authors. To our knowledge, the first one was due to Bastard,<sup>3</sup> who used as the wave function of the ground state a Slater-type  $1s$  hydrogenlike function times the wave function of the ground state of the QW. Using a calculation based on a single variation-

al parameter he obtained the energy of an electron as a function of the position of the impurity. Bastard *et al.*<sup>4</sup> also calculated the energy level of the  $2p_{x,y}$  states and the imaginary part of the dielectric function for the transition  $1s \rightarrow 2p_{x,y}$ . Later, Greene and Bajaj calculated the impurity energy levels in the presence of a magnetic field, using a basis of Gaussian-type orbitals.<sup>5-7</sup> In a review article, Shanabrook<sup>8</sup> lists an extensive bibliography on hydrogenlike impurity levels. In this work we add to these results the calculation of the states  $2s$ ,  $3s$ ,  $3p_{\pm}$ , and  $3d2_{\pm}$ , using a set of Slater-type wave functions.

The system of an electron bound to an impurity inside an infinite QW is described by the following Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Ku} + V(z), \quad (1)$$

where  $u = [x^2 + y^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}$  is the distance between the electron and the impurity located at  $(0, 0, z_i)$ ,  $m^*$  is the effective mass of the electron,  $K$  is the effective dielectric constant, and  $V(z)$  is the confining potential:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{if } |z| < L/2 \\ \infty & \text{if } |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (2)$$

Here  $L$  is the well width. We assume the donor impurity located at  $|z_i| \leq L/2$ .

In the case of a structure formed by GaAs and  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ , we neglect the image potential in view of the small difference between the two dielectric constants of the materials that form the QW. The wave functions are built as products of the ground-state wave function of

the QW times hydrogenlike wave functions. Defining

$$P_n(v) = 1 + a_1(L)v + a_2(L)v^2 + \dots + a_n(L)v^n \quad (3)$$

we have, in cylindrical coordinates  $(z, \rho, \varphi)$ ,

$$\phi_{n_s}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{\text{SB}}(z) P_{n-1}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (4)$$

$$\phi_{np_s}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{\text{SB}}(z) \rho e^{-i\varphi} P_{n-2}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (5)$$

$$\phi_{nd2_s}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{\text{SB}}(z) \rho^2 e^{-i2\varphi} P_{n-3}(\kappa u) e^{-\kappa u}, \quad (6)$$

where

$$\Phi_{\text{SB}}(z) = \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \quad (7)$$

is the ground-state wave function of the QW.

In the above equations we used a single variational parameter,  $\kappa$ . In this paper we do not calculate states as  $np_0$  because, as shown by Greene and Bajaj,<sup>7</sup> they become unbound as the QW width becomes sufficiently small. Therefore, we are concerned with states that stay bound in the two-dimension (2D) limit. These states are labeled by Ghazali, Gold, and Serre<sup>9</sup> until  $n=3$ .

The coefficients  $a_j(L)$  are determined in such a way that we have the correct 2D and 3D limits when  $L$  tends to 0 and  $\infty$ , respectively. For example, the coefficient  $a_1(L)$  that appears in  $P_1(\kappa u)$  for the wave function  $\phi_{2_s}(\kappa, \mathbf{r})$  has the limits  $-2$  and  $-1$  as  $L$  goes to 0 and  $\infty$ , respectively, as we see from the hydrogen wave functions in 2D and 3D. We have chosen to express these coefficients as

$$a_j(L) = \left[ \frac{a_j^{3D} - a_j^{2D}}{2} \right] \tanh(L-5) + \left[ \frac{a_j^{3D} + a_j^{2D}}{2} \right] \quad (8)$$

in order to have a good fitting of the limits

$$a_j^{3D} \equiv a_j(\infty), \quad (9)$$

$$a_j^{2D} \equiv a_j(0) \quad (10)$$

when  $L \gg 5a^*$  or  $L \ll 5a^*$  in each case, where  $a^*$  is the effective Bohr radius, which for GaAs is 98 Å. However, we must point out that the results for the energies are not very sensitive to the choice of the value of  $L$  corresponding to the crossing over. But we know that for  $L \geq 10a^*$  the 1s state is already very close to the 3D hydrogen ground state. In Table I we give the limits of the coefficients used in this work.

As we must have orthogonal wave functions, we use the Schmidt process shown below:

$$\Psi_{1_s}(\mathbf{r}) = A_{1_s} \phi_{1_s}(\alpha, \mathbf{r}), \quad (11)$$

$$\Psi_{2_s}(\mathbf{r}) = A_{2_s} [\phi_{2_s}(\kappa, \mathbf{r}) - \chi \Psi_{1_s}(\mathbf{r})], \quad (12)$$

$$\Psi_{2p_s}(\mathbf{r}) = A_{2p_s} \phi_{2p_s}(\gamma, \mathbf{r}), \quad (13)$$

$$\Psi_{3_s}(\mathbf{r}) = A_{3_s} [\phi_{3_s}(\eta, \mathbf{r}) - \lambda \Psi_{1_s}(\mathbf{r}) - \zeta \Psi_{2_s}(\mathbf{r})], \quad (14)$$

TABLE I. Coefficients  $a_j(L)$  for the limits  $L \rightarrow 0$  and  $L \rightarrow \infty$ .

$L$	$a_1^{2D}$	$a_1^{3D}$	$a_2^{3D}$	$a_1^{3p_s}$
$\infty$	-1	-2	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$
0	-2	-4	2	$-\frac{1}{3}$

$$\Psi_{3p_s}(\mathbf{r}) = A_{3p_s} [\phi_{3p_s}(\mu, \mathbf{r}) - \epsilon \Psi_{2p_s}(\mathbf{r})], \quad (15)$$

$$\Psi_{3d2_s}(\mathbf{r}) = A_{3d2_s} \phi_{3d2_s}(\nu, \mathbf{r}). \quad (16)$$

In Fig. 1 we show the energy curves of the levels 1s, 2s, 2p<sub>s</sub>, 3s, 3p<sub>s</sub>, and 3d2<sub>s</sub> as a function of  $z_i$  for  $L$  equal to  $1a^*$ . We notice that the energies of the states with the same quantum number  $n$  are nearly degenerate. The dispersion in energy decreases as  $n$  (principal quantum number) increases. The binding energies of these states, for impurities at the center of the QW, versus the well width are in between 2D and 3D limits, as expected (Fig. 2).

In the dilute regime the optical transition between a determined pair of states is of the intrasite type, i.e., the transition occurs between two levels belonging to the same impurity. In this paper we study the absorption coefficient for several transitions possible. We are interested, then, in calculating the real part of the optical conductivity  $\sigma_1(\omega)$  for these transitions.

Let  $\sigma_1(z_i, \omega)$  be the contributions to  $\sigma_1(\omega)$  due to an impurity located at  $z_i$ , for the transition between the levels  $m$  and  $n$  by absorption of a photon of frequency  $\omega$  and whose wave vector is perpendicular to the QW's wall. We may write for the transition probability  $W(z_i, \omega)$  per unity time<sup>10</sup>

$$\hbar\omega W(z_i, \omega) = \sigma_1(z_i, \omega) \langle \mathbf{E}^2 \rangle. \quad (17)$$

$W(z_i, \omega)$  is given by Fermi's golden rule,

$$W(z_i, \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle n \left| \frac{-e}{Km^*c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right| m \right\rangle \right|^2 \delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega), \quad (18)$$

where

$$\Delta E(z_i) = E_n(z_i) - E_m(z_i). \quad (19)$$

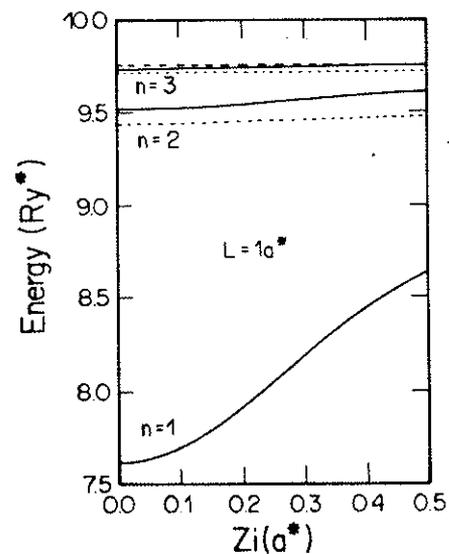


FIG. 1. Energy levels of states 1s, 2s, 2p<sub>s</sub>, 3s, 3p<sub>s</sub>, and 3d2<sub>s</sub> for  $L = 1a^*$ . We characterize the s states with solid lines, p states with short-dashed lines, and the 3d2<sub>s</sub> state with long-dashed lines.

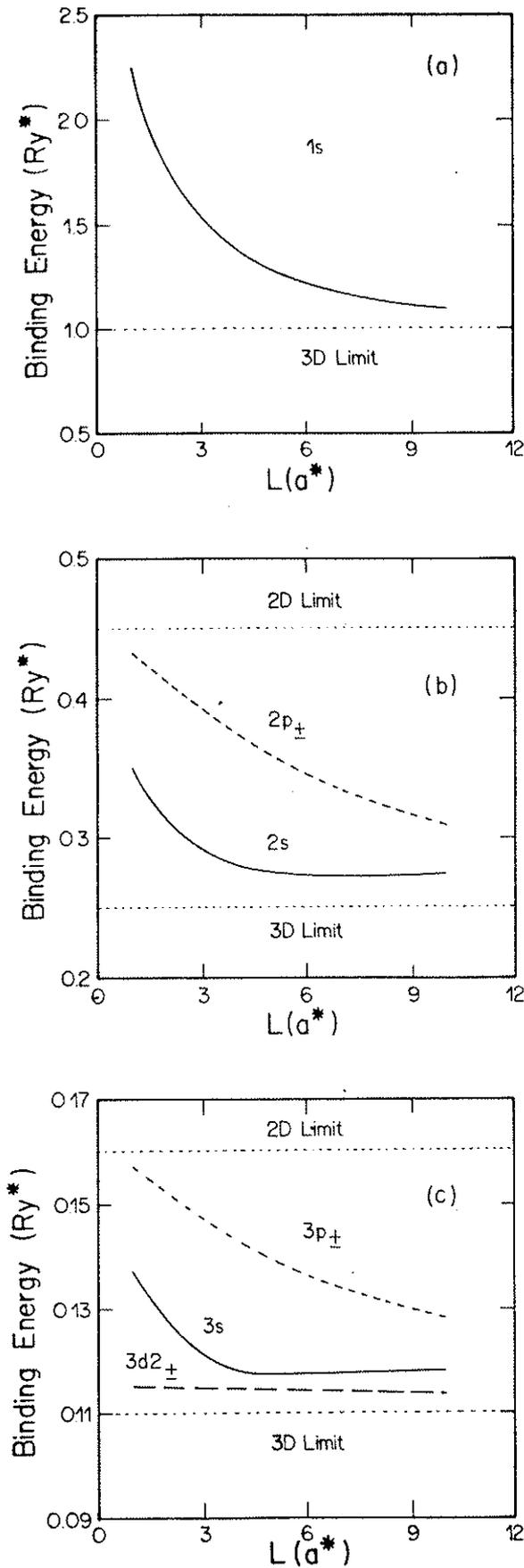


FIG. 2. Binding energies of an electron bound to an impurity at the center of the QW. (a) 1s state, (b) 2s and 2p<sub>±</sub> states, and (c) 3s, 3p<sub>±</sub>, and 3d2<sub>±</sub> states. The conventions are the same as above.

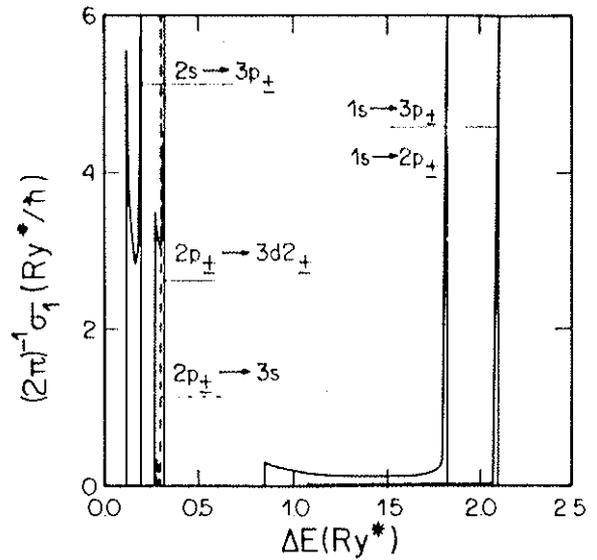


FIG. 3. Absorption coefficient for the 1s → 2p<sub>±</sub>, 1s → 3p<sub>±</sub>, 2p<sub>±</sub> → 3s, 2p<sub>±</sub> → 3d2<sub>±</sub>, and 2s → 3p<sub>±</sub> transitions with L = 1a\*. The 2p<sub>±</sub> → 3s transition is represented by a dashed line.

As

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \mathbf{u} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (20)$$

where  $\mathbf{u}$  is the polarization unit vector for the wave whose potential vector is  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  and

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle = \frac{E_0^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} A_0^2, \quad (21)$$

after performing a long-wavelength approximation, we have

$$\sigma_1(z_i, \omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega |\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \delta(\Delta E(z_i) - \hbar \omega). \quad (22)$$

To obtain  $\sigma_1(\omega)$ , we must sum up the contributions of all impurities located in the QW. For the distribution of impurities  $P(z_i)$  we have

$$\sigma_1(\omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega \int_{-L/2}^{L/2} P(z_i) |\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \times \delta(\Delta E(z_i) - \hbar \omega) dz_i. \quad (23)$$

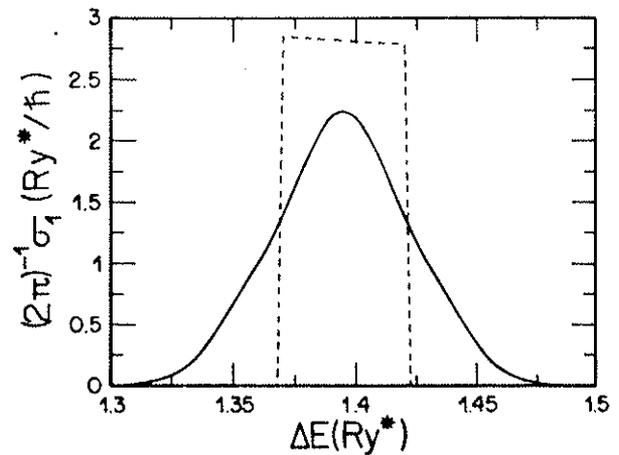


FIG. 4. Absorption coefficient for the 1s → 2p<sub>±</sub> transition with Gaussian (solid line) and δ-like (dashed line) distributions for the doping width  $d = 0.02a^*$  and  $z_m = 0.25a^*$ .

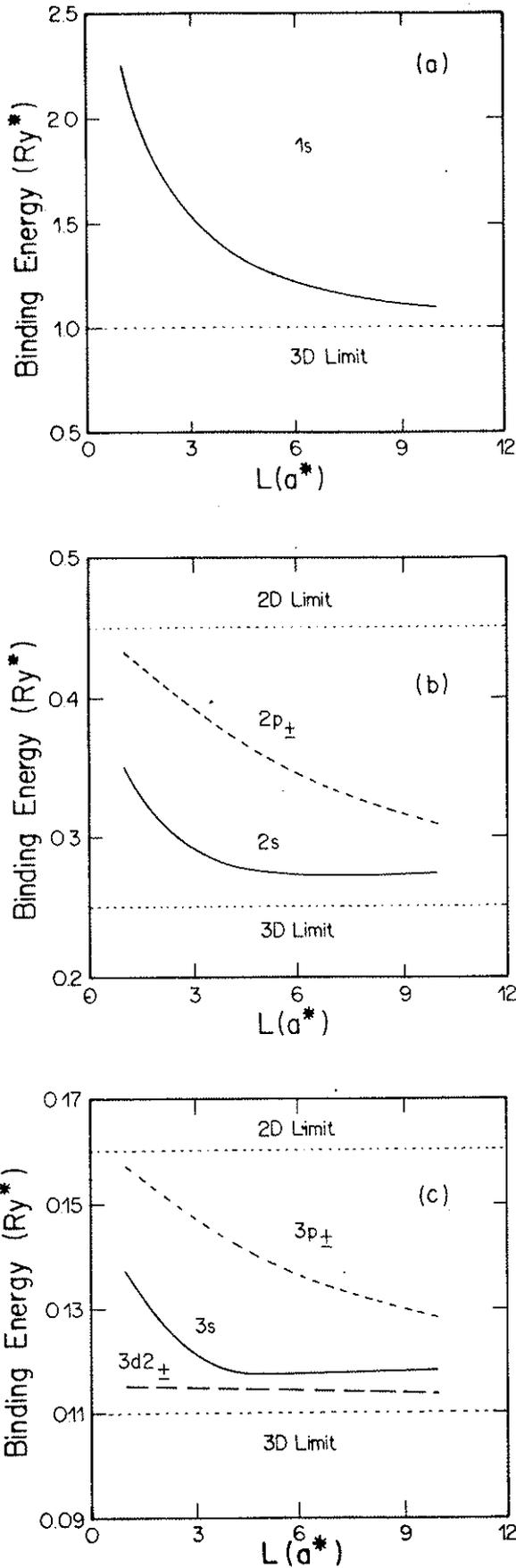


FIG. 2. Binding energies of an electron bound to an impurity at the center of the QW. (a) 1s state, (b) 2s and 2p<sub>±</sub> states, and (c) 3s, 3p<sub>±</sub>, and 3d<sub>±</sub> states. The conventions are the same as above.

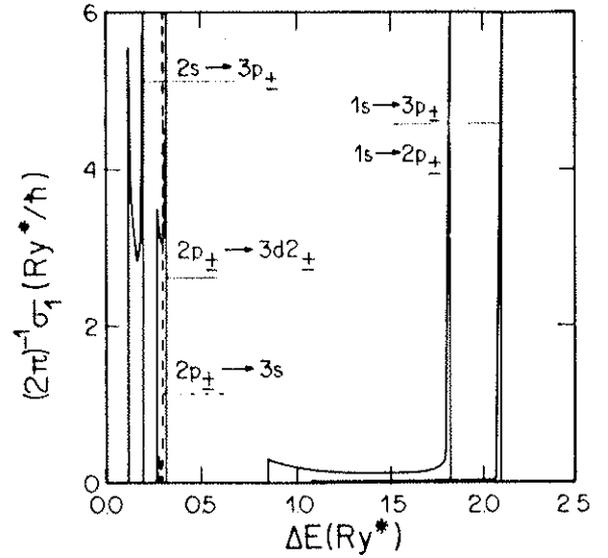


FIG. 3. Absorption coefficient for the 1s → 2p<sub>±</sub>, 1s → 3p<sub>±</sub>, 2p<sub>±</sub> → 3s, 2p<sub>±</sub> → 3d<sub>±</sub>, and 2s → 3p<sub>±</sub> transitions with  $L=1a^*$ . The 2p<sub>±</sub> → 3s transition is represented by a dashed line.

As

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \mathbf{u} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (20)$$

where  $\mathbf{u}$  is the polarization unit vector for the wave whose potential vector is  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  and

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle = \frac{E_0^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} A_0^2, \quad (21)$$

after performing a long-wavelength approximation, we have

$$\sigma_1(z_i, \omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega |\mathbf{u} \cdot \langle \mathbf{n} | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega). \quad (22)$$

To obtain  $\sigma_1(\omega)$ , we must sum up the contributions of all impurities located in the QW. For the distribution of impurities  $P(z_i)$  we have

$$\sigma_1(\omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega \int_{-L/2}^{L/2} P(z_i) |\mathbf{u} \cdot \langle \mathbf{n} | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \times \delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega) dz_i. \quad (23)$$

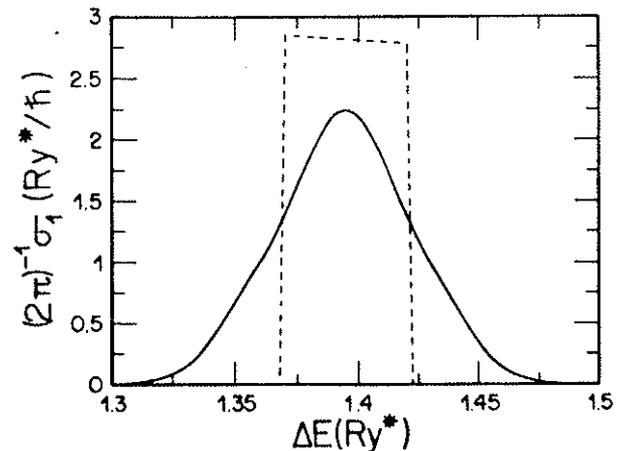


FIG. 4. Absorption coefficient for the 1s → 2p<sub>±</sub> transition with Gaussian (solid line) and δ-like (dashed line) distributions for the doping width  $d=0.02a^*$  and  $z_m=0.25a^*$ .

But

$$\delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega) = \sum_i \frac{\delta(z_i - z_l)}{\left| \frac{d\Delta E(z_i)}{dz_i} \right|_{\Delta E(z_i) = \hbar\omega}}, \quad (24)$$

where  $z_l$  is the value of the continuous variable  $z$  such that  $\Delta E(z) = \hbar\omega$ . Then

$$\sigma_1(\omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega \sum_i \frac{P(z_l) |\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2}{\left| \frac{d\Delta E(z_i)}{dz_i} \right|_{\Delta E(z_i) = \hbar\omega}}. \quad (25)$$

Calling

$$|\mathbf{u} \cdot \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 = T_{nm}(\Delta E(z_i)) \quad (26)$$

and remembering that  $\Delta E(z_i)$  is an even function, we have

$$\sigma_1(\omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega D(\hbar\omega) T_{nm}(\hbar\omega), \quad (27)$$

where  $D(\hbar\omega)$  is the joint density between the states  $n$  and  $m$ . We see then that  $\sigma_1(\omega)$  is obtained by weighing the  $D(\hbar\omega)$  by the oscillator strength of the transition.

In this work we analyze three types of doping. First, the uniform one:

$$P(z_i) = \frac{1}{L}. \quad (28)$$

Figure 3 shows  $\sigma_1(\omega)$  for the  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$ ,  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ ,  $2p_{\pm} \rightarrow 3s$ ,  $2p_{\pm} \rightarrow 3d_{\pm}$ , and  $2s \rightarrow 3p_{\pm}$  transitions with  $L = 1a^*$ .

As we can see, each transition presents two peaks. The peak corresponding to the highest energy is due to transitions occurring in the middle of the well. It is a consequence of the singularity of the joint density of states in that energy. The secondary peak comes from the impurities located at the edges of the well. The  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  and  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  transitions are broader than the others. Comparing our results with those experimental results obtained by Shanabrook and co-workers<sup>11</sup> for the transition  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  for the zero-magnetic-field limit, we obtain an error smaller than 4%.

Other types of doping are the Gaussian- [ $P_G(z_i)$ ] and  $\delta$ -like [ $P_{\delta}(z_i)$ ] ones. We take distributions centered in  $z_m$ , with the width  $d$ , that is,

$$P_G(z_i) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}d} \exp \left[ -\frac{2(z_i - z_m)^2}{d^2} \right], \quad (29)$$

$$P_{\delta}(z_i) = \begin{cases} 1/d & \text{if } z_m - d/2 < z_i < z_m + d/2 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (30)$$

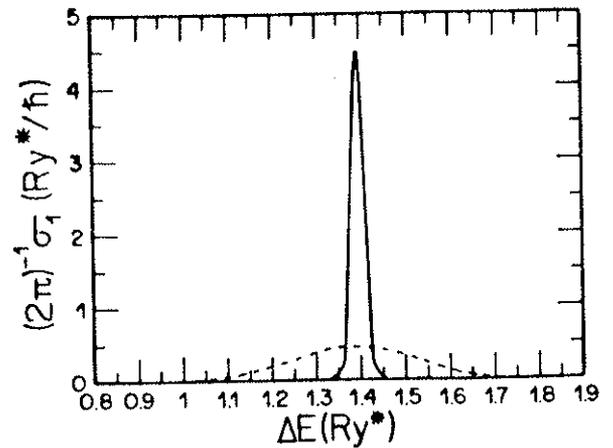


FIG. 5. Absorption coefficient for the  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  transition with Gaussian distribution for doping widths  $d = 0.1a^*$  (dashed line) and  $d = 0.01a^*$  (solid line), both for  $z_m = 0.25a^*$ .

The  $\sigma_1(\omega)$  for the  $\delta$ -like distribution looks like a piece of  $\sigma_1(\omega)$  for the uniform one, while for the Gaussian distribution we have a Gaussian structure. As we see in Fig. 4 these absorption coefficients do not present peaks, unless the doping is in the middle of the well. If the doping width becomes very narrow, there is an appearance of a peak, as is shown in Fig. 5. This fact suggests the manufacture of QW's with a sharp absorption spectra.

The energy levels have been obtained by a single-parameter variational calculation. The advantage of this strategy is a simplification on the integrals of energy and normalization constant as well as the computation of the extremes. In fact, the time spent in a two-parameter calculation increases without significant progress in calculation for the  $1s$  state.<sup>12</sup> The price to be paid is the appearance of some strange features in one of our curves, as we can see in Fig. 3 for the absorption coefficients for the  $2p_{\pm} \rightarrow 3s$  transition, for  $L = 1a^*$ .

Summarizing, in this work we report on the results obtained for the absorption coefficients for three different types of impurity distributions on a QW. We have found that the absorption coefficients are strongly dependent on the analyzed impurity distributions. It is interesting to point out that a sharp peak is observed for this coefficient when the width of the distribution becomes thinner.

We would like to thank Dr. K. Watari for fruitful discussions on numerical methods for minimizing the computational time. One of us (P.D.E.) is grateful to Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Ensino Superior for financial support.

<sup>1</sup>E. Glaser, B. V. Shanabrook, R. L. Hawkins, and W. Beard, Phys. Rev. B **36**, 8185 (1987).

<sup>2</sup>E. Glaser, B. V. Shanabrook, R. J. Wagner, R. L. Hawkins, W. J. Moore, and D. Musser, J. Phys. (Paris) Colloq. **48**, C5-239 (1987).

<sup>3</sup>G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981).

<sup>4</sup>G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, Solid State Commun. **45**, 367 (1983).

<sup>5</sup>R. L. Greene and K. K. Bajaj, Solid State Commun. **45**, 825 (1983).

<sup>6</sup>R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **31**, 913 (1985).

<sup>7</sup>R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **37**, 4604 (1988).

<sup>8</sup>B. V. Shanabrook, Physica B **146**, 121 (1987).

<sup>9</sup>A. Ghazali, A. Gold, and J. Serre, Phys. Rev. B **39**, 3400 (1989).

<sup>10</sup>J. N. Hodgson, *Optical Absorption and Dispersion in Solids* (Chapman and Hall, London, 1970).

<sup>11</sup>N. C. Jarosik, B. D. McCombe, B. V. Shanabrook, J. Comas, J. Ralston, and G. Wicks, Phys. Rev. Lett. **54**, 1283 (1985).

<sup>12</sup>B. C. F. Colchesqui, P. D. Emmel, E. A. de Andrada e Silva, and I. C. da Cunha Lima, Phys. Rev. B **40**, 12 513 (1989).

## EFFECT OF COMPENSATION ON THE ABSORPTION COEFFICIENT FOR SHALLOW DONORS IN A QUANTUM WELL

P.D. Emmel\*† and I.C. da Cunha Lima†‡

\*Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, Via Washington Luiz km 235, 13560 São Carlos SP, Brazil

†Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516 01498, São Paulo SP, Brazil

‡Instituto de Pesquisas Espaciais, CP 515 12201 São José dos Campos SP, Brazil

(Received 19 October 1990 by J. Tauc)

In this paper we calculate by Monte Carlo simulation the effect of compensation on the intra-impurity absorption coefficient for the transitions  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  and  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  between impurity states inside a  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  quantum well. We compare these results with those coming out by neglecting Coulomb interactions between impurities and using the Fermi level obtained in this way to establish the lower edge in the absorption coefficient. We observe that the randomness in the Coulomb interaction introduces a tail in the low frequency side at the time it smooths the peak corresponding to absorptions close to the interfaces.

SHALLOW impurities play an important role in the properties of semiconductor quantum wells and are always present in the growth process. If we consider donor impurities lying in the higher gap material, like  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  in the  $\text{GaAlAs}/\text{GaAs}$  structure, electrons will evolve in such way that, in equilibrium, they will be trapped in the low gap region by the confining potential generated by the gap mismatch and will give origin to a 2-D electron gas. This is the case, however, for heavily doping. In the dilute regime an impurity band will appear below the first subband, created by localized states. Except for the magnitude of the binding energy and by the strength of the scattering potential, a similar situation occurs when the impurities are located inside the low gap region, in our example the GaAs layer. It is well known that shallow impurities inside a quantum well (QW) have their eigen-energies for the electron bound states depending on their location [1, 2]. The confinement potential introduced by the interfaces between the lower and the higher gap materials perturbs the hydrogen-like states in such a way that a bandwidth appears for each of them. If the impurity concentration is sufficiently low, we can neglect the overlap between neighboring impurities [3]. The observed width in the density of states should be, then, caused only by the dispersion on the energy eigenvalues and their separations. This confinement potential also causes a bandwidth to occur on the transition probabilities between those states [4, 5]. In the diluted regime we should expect the transition to be intra-site.

In the case we are considering here, we take  $N_a$  acceptors and  $N_d$  donors per unit volume inside the QW. The compensation is  $k = N_a/N_d$ ,  $k \leq 1$  for an  $n$ -type sample. The first step in any calculation concerning the diluted regime is to obtain the ground state for the electron system, since  $N_d$  donors become ionized. The search of the ground state, assumed to be a set of singly occupied  $1s$  (hydrogen-like) states centered at randomly distributed impurities and its configurational average are performed by Monte Carlo simulation [6].

An immediate effect of the compensation in the QW is to introduce a non-uniform distribution of neutral donors. Since the binding energies for these hydrogen-like states are bigger in the middle of the well, compensation causes the impurities closer to the interfaces to be ionized [7].

Neglecting the fluctuations due to the randomness in the impurities locations and their Coulomb interactions — which, in the diluted regime can be taken as classical interactions among point charges [8] — the width of the neutral donor layer is given by  $\delta = L(1 - k)$  [7]. That should be the region where the infrared absorption occurs. The non-uniform distribution of ionized donors creates, in the lowest order, a macroscopic electrostatic potential. Its effect on the electron state energies, however, has been proved to be negligible for impurity concentrations in the range of interest ( $10^8$ – $10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ). Within this approximation the Fermi level is obtained from the unperturbed DOS

by imposing charge neutrality. In what concerns the absorption coefficient, it cancels in the low energy region up to the point corresponding to the transition at the Fermi level. This occurs only because there is a one-to-one relation between the impurity position and the difference in energy between the states  $1s$  and the  $2p_{\pm}$  and  $3p_{\pm}$  [5].

Monte Carlo simulations performed in the QW have shown that randomness and Coulomb interaction among impurities affect drastically the DOS [9]. Not only its higher energy peak decreases with compensation, but also a Coulomb gap with a typical 2-D signature occurs, confirming what has been previously obtained in 3-D for doped semiconductors by the group in Leningrad [6, 8].

The question if this DOS is observed for realizable concentrations is still a question of controversy. Some authors have calculated the DOS using diagrammatic techniques [10, 11], in which the overlap between neighboring states is not neglected but is taken into account through a finite transfer matrix. Extending their results to the low concentration limit they obtain one-peaked DOS with bandwidths of the same order of magnitude of those obtained assuming independent impurities.

The system of an electron bound to an impurity inside an infinite QW is described by the following Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{Ku} + V(z), \quad (1)$$

where  $u = (x^2 + y^2 + (z - z_i)^2)^{1/2}$  is the distance between the electron and the impurity located at  $(0, 0, z_i)$ ,  $m^*$  is the effective mass of the electron,  $K$  is the effective dielectric constant and  $V(z)$  is the confining potential:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \text{if } |z| < L/2 \\ \infty, & \text{if } |z| \geq L/2. \end{cases} \quad (2)$$

Here  $L$  is the well width. We assume the donor impurity located at  $|z_i| \leq L/2$ .

In the case of a structure formed by GaAs and  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ , we neglect the image potential in view of the small difference between the two dielectric constants of the materials that form the QW. The wavefunctions are built as products of the ground state wave function of the QW times hydrogen-like wavefunctions. Defining

$$P_n(v) = 1 + a_1(L)v + a_2(L)v^2 + \dots + a_n(L)v^n, \quad (3)$$

we have, in cylindrical coordinates  $(z, \rho, \varphi)$ :

$$\phi_{n\pm}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{\text{SB}}(z)P_{n-1}(\kappa u)e^{-\kappa u}, \quad (4)$$

$$\phi_{n\pm}(\kappa, \mathbf{r}) = \Phi_{\text{SB}}(z)\rho e^{i\varphi}P_{n-2}(\kappa u)e^{-\kappa u}, \quad (5)$$

where

$$\Phi_{\text{SB}}(z) = \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right), \quad (6)$$

is the ground state wave function of the QW. In the above equations we used a single variational parameter,  $\kappa$ .

The coefficients  $a_j(L)$  are determined in such a way that we have the correct 2-D and 3-D limits when  $L$  tends to 0 and  $\infty$ , respectively. For example, the coefficient  $a_1(L)$  that appears in  $P_1(\kappa u)$  for the wave function  $\phi_2(\kappa, \mathbf{r})$  has the limits  $-2$  and  $-1$  as  $L$  goes to 0 and  $\infty$  respectively, as we see from the hydrogen wave functions in 2-D and 3-D. We have chosen to express these coefficients as

$$a_j(L) = \left(\frac{a_j^{3D} - a_j^{2D}}{2}\right) \tanh(L - 5a^*) + \left(\frac{a_j^{3D} + a_j^{2D}}{2}\right), \quad (7)$$

in order to have a good fitting of the limits

$$a_j^{3D} \equiv a_j(\infty), \quad (8)$$

$$a_j^{2D} \equiv a_j(0), \quad (9)$$

when  $L \gg 5a^*$  or  $L \ll 5a^*$  in each case, where  $a^*$  is the effective Bohr radius, which for GaAs is  $98 \text{ \AA}$ . However, we must point out that the results for the energies are not very sensitive to the choice of the value of  $L$  corresponding to the crossing over. But we know that for  $L \geq 10a^*$  the  $1s$  state is already very close to the 3-D hydrogen ground state.

As we must have orthogonal wavefunctions, we use the Schmidt process shown below:

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = A_{1s}\phi_{1s}(\alpha, \mathbf{r}), \quad (10)$$

$$\Psi_{2p_{\pm}}(\mathbf{r}) = A_{2p_{\pm}}\phi_{2p_{\pm}}(\gamma, \mathbf{r}), \quad (11)$$

$$\Psi_{3p_{\pm}}(\mathbf{r}) = A_{3p_{\pm}}[\phi_{3p_{\pm}}(\mu, \mathbf{r}) - \epsilon\Psi_{2p_{\pm}}(\mathbf{r})]. \quad (12)$$

In this article we discuss the effect of compensation in the absorption coefficient for the  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  and  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$  transitions. In consequence of the low impurity concentration the overlap of the bound electrons wave functions are negligible and the transitions induced by light absorption will occur in single sites, i.e., they will be intra-impurity absorptions. We take as an example donor impurities, like Si in  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  inside  $n$ -type quantum wells.

The contribution of the transition  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  to the imaginary part of the dielectric constant has been obtained by Bastard *et al.* [4]. Recently, Emmel *et al.* completed the study of other transitions between low

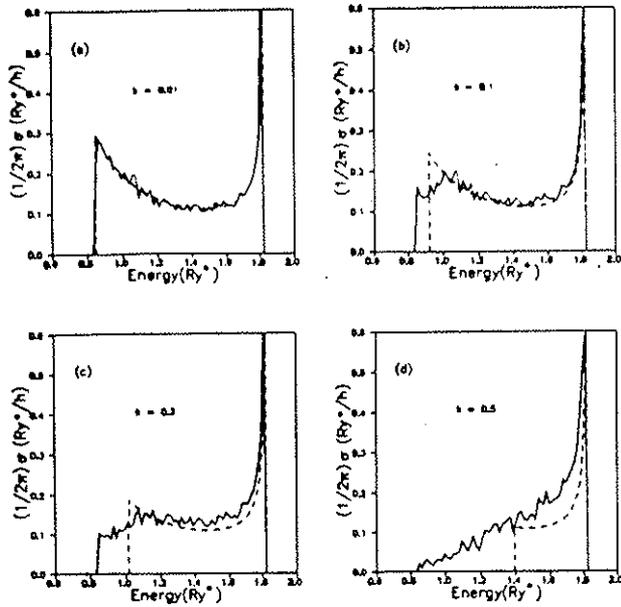


Fig. 1. Contribution of the transition  $1s \rightarrow 2p_{\pm}$  to the absorption coefficient for the indicated values of the compensation. Solid lines represent the results obtained via Monte Carlo simulation; traced lines are the results neglecting Coulomb interaction between impurities.

lying states [5]. The absorption coefficient for the transition  $m-n$  is given by:

$$\sigma(z_i, \omega) = \pi \frac{e^2}{K} \omega |\mathbf{u} \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega). \quad (13)$$

To obtain  $\sigma(\omega)$ , we must sum up the contributions of all impurities located in the QW. For a uniform distribution of impurities  $P(z_i) = 1/L$  we have:

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{L K} \omega \int_{-L/2}^{L/2} |\mathbf{u} \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega) dz_i. \quad (14)$$

But,

$$\delta(\Delta E(z_i) - \hbar\omega) = \sum_i \frac{\delta(z_i - z_i)}{\left| \frac{d\Delta E(z_i)}{dz_i} \right|_{\Delta E(z_i) = \hbar\omega}}, \quad (15)$$

where  $z_i$  is the value of the continuous variable  $z$  such that  $\Delta E(z) = \hbar\omega$ . Then

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{L K} \omega \sum_i \frac{|\mathbf{u} \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2}{\left| \frac{d\Delta E(z_i)}{dz_i} \right|_{\Delta E(z_i) = \hbar\omega}}, \quad (16)$$

where  $\mathbf{u}$  is the polarization unit vector and  $\Delta E(z_i)$  is the energy separation between the two states for an impurity located at position  $z_i$ .

However, if we take the compensation into

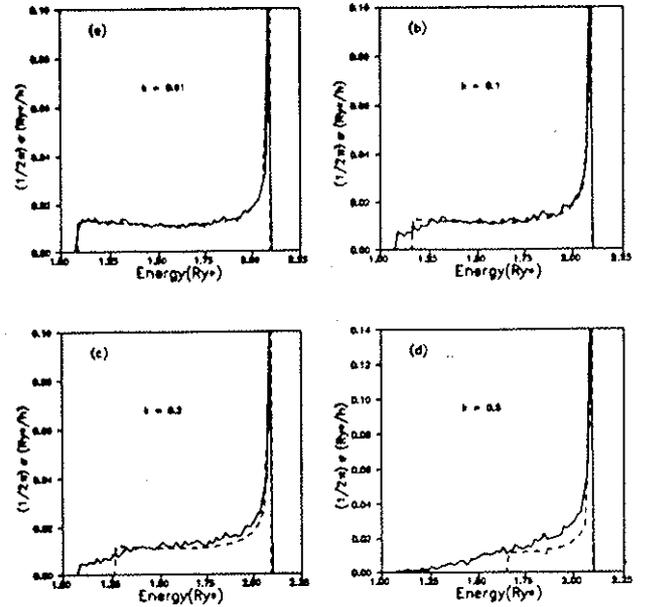


Fig. 2. Same as above, for the transition  $1s \rightarrow 3p_{\pm}$ .

account, some donor impurities, as we have mentioned, become ionized in regions close to the surface and do not contribute to  $\sigma$ . In that case, the most suitable technique to cover the whole range of the compensation has been proved to be Monte Carlo simulation. The algorithm used has been explained in detail elsewhere [8]. The impurities, donors and acceptors, are distributed randomly inside a box representing the quantum well. We assume the temperature to be low enough in such a way that all acceptors are ionized and no double occupancy is allowed for donors. Electrons at donor sites are distributed randomly and by exchanging their locations one tries to obtain the state of lowest energy. With this result histograms for the energy difference  $E_{2p,3p} - E_{1s}$  are constructed taking into account only the contribution of neutral donors. The last step corresponds to averaging on the impurities configurations (realizations). The absorption coefficient is obtained by changing the integration in equation (14):/

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{K} \omega \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} |\mathbf{u} \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 \times \delta(\Delta E - \hbar\omega) W(\Delta E) d\Delta E. \quad (17)$$

The histograms for the energy different  $E_{2p,3p} - E_{1s}$ , which are the function  $W(\Delta E)$  in equation (17), are constructed taking into account the contributions of neutral donors only. The integral in equation (17) corresponds to:

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{K} \omega |\mathbf{u} \langle n | \mathbf{r} | m \rangle|^2 W(\hbar\omega). \quad (18)$$

Our calculations were performed for  $L = 1a^*$  and an effective donor concentration of  $10^6 \text{ cm}^{-2}$ . We used 800 donor impurities in our simulation and the configurational average we obtained using 15 realizations. In Fig. 1 we show our results for the transition  $1s \rightarrow 2p_z$  for  $k = 0.01, 0.1, 0.2$  and  $0.5$ . The solid line represents the result obtained by Monte Carlo simulation, and the traced line represents the approximation of neglecting the Coulomb interaction between point charges, so a sharp interface occurs (frontier) between the ionized and the neutral donors. Comparing the two cases we see that the effect of compensation is to introduce a tail in the low frequency side of the absorption coefficient and to relax the peak corresponding to the absorption by the neutral donors close to the frontier.

In Fig. 2 the part due to the transition  $1s \rightarrow 3p_z$  is shown for the same parameters. We see the same general behavior. We observe also that this transition gives a much weaker contribution to the absorption coefficient but gives rise to a sharp peak close to  $2.1 \text{ Ry}^*$  ( $12.2 \text{ meV}$ ) which is the difference between the states  $1s$  and  $3p_z$  at the center of the QW.

## REFERENCES

1. G. Bastard, *Phys. Rev.* **B24**, 4714 (1981).
2. R.L. Greene & K.K. Bajaj, *Solid State Commun.* **45**, 825 (1983).
3. P.D. Emmel, E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B40**, 3394 (1989).
4. G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang & L. Esaki, *Solid State Commun.* **45**, 367 (1983).
5. P.D. Emmel, J.R. Leite & I.C. da Cunha Lima *Phys. Rev. B*, **43**, 9265 (1991).
6. A.L. Efros, N. Van Lien & B.I. Shklovskii, *J. Phys.* **C12**, 1869 (1979).
7. B.C.F. Colchesqui, P.D. Emmel, E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B40**, 12513 (1989).
8. B.I. Shklovskii & A.L. Efros, *Fiz. Tekh. Poluprovdn.* **14**, 825 (1980); [*Sov. Phys. Semicond.* **14**, 487 (1980)].
9. E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B39**, 10101 (1989).
10. A. Gold, J. Serre & A. Ghazali, *Phys. Rev.* **B37**, 4589 (1988); *Phys. Rev.* **B39**, 8499 (1989).
11. I.C. da Cunha Lima & A. Ferreira da Silva (to appear).

Our calculations were performed for  $L = 1a^*$  and an effective donor concentration of  $10^8 \text{ cm}^{-2}$ . We used 800 donor impurities in our simulation and the configurational average we obtained using 15 realizations. In Fig. 1 we show our results for the transition  $1s \rightarrow 2p_z$  for  $k = 0.01, 0.1, 0.2$  and  $0.5$ . The solid line represents the result obtained by Monte Carlo simulation, and the traced line represents the approximation of neglecting the Coulomb interaction between point charges, so a sharp interface occurs (frontier) between the ionized and the neutral donors. Comparing the two cases we see that the effect of compensation is to introduce a tail in the low frequency side of the absorption coefficient and to relax the peak corresponding to the absorption by the neutral donors close to the frontier.

In Fig. 2 the part due to the transition  $1s \rightarrow 3p_z$  is shown for the same parameters. We see the same general behavior. We observe also that this transition gives a much weaker contribution to the absorption coefficient but gives rise to a sharp peak close to  $2.1 \text{ Ry}^*$  ( $12.2 \text{ meV}$ ) which is the difference between the states  $1s$  and  $3p_z$  at the center of the QW.

## REFERENCES

1. G. Bastard, *Phys. Rev.* **B24**, 4714 (1981).
2. R.L. Greene & K.K. Bajaj, *Solid State Commun.* **45**, 825 (1983).
3. P.D. Emmel, E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B40**, 3394 (1989).
4. G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang & L. Esaki, *Solid State Commun.* **45**, 367 (1983).
5. P.D. Emmel, J.R. Leite & I.C. da Cunha Lima *Phys. Rev. B.* **43**, 9265 (1991).
6. A.L. Efros, N. Van Lien & B.I. Shklovskii, *J. Phys.* **C12**, 1869 (1979).
7. B.C.F. Colchesqui, P.D. Emmel, E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B40**, 12513 (1989).
8. B.I. Shklovskii & A.L. Efros, *Fiz. Tekh. Poluprovdn.* **14**, 825 (1980); [*Sov. Phys. Semicond.* **14**, 487 (1980)].
9. E.A. de Andrada e Silva & I.C. da Cunha Lima, *Phys. Rev.* **B39**, 10101 (1989).
10. A. Gold, J. Serre & A. Ghazali, *Phys. Rev.* **B37**, 4589 (1988); *Phys. Rev.* **B39**, 8499 (1989).
11. I.C. da Cunha Lima & A. Ferreira da Silva (to appear).

# Bibliografia

- [Ab 64] M. Abramowitz e I. A. Stegun  
*Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and  
Mathematical Tables*  
Dover Publications, Inc. (1964)
- [An 82] T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern  
Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982)
- [Ar 68] J. R. Arthur  
J. Appl. Phys. **19**, 4032 (1968)
- [Ar 85] G. Arfken  
*Mathematical Methods for Physicists*  
Academic Press, Inc. (1985)
- [As 76] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin  
*Solid State Physics*  
Holt, Rinehart, and Winston (1976)
- [Ba 74] F. Bassani, G. Iadonisi e B. Preziosi  
Rep. Prog. Phys. **37**, 1099 (1974)
- [Ba 79] S. D. Baranovskii, A. L. Efros, B. L. Gel'mont e B. I. Shklovskii  
J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 1023 (1979)
- [Ba 81] G. Bastard  
Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981)
- [Ba 83] G. Bastard, E. F. Mendez, L.L. Chang e L. Esaki  
Solid State Commun. **45**, 367 (1983)

- [Ba 88] S. D. Baranovskii, B. L. Gel'mont, E. A. de Andrada e Silva e I. C. da Cunha Lima  
Sov. Phys. Semicond. **22**, 1002 (1988)
- [Ba 90] G. Bastard  
*Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*  
Les éditions de physique
- [Be 66] D. J. Ben-Daniel e C. B. Duke  
Phys. Rev. **152**, 683 (1966)
- [Bo 66] M. L. Boas  
*Mathematical Methods in the Physical Sciences*  
John Wiley & Sons, Inc. (1966)
- [Ca 78] H. C. Casey e M. B. Panish  
*Heterostructure Lasers*  
Academic, New York (1978)
- [Ch 71] A. Y. Cho  
J. Vac. Technol. **8**, 531 (1971)  
Appl. Phys. Lett. **19**, 467 (1971)
- [Ch 84] Yia-Chung Chang, W. T. Masselink e H. Morkoç  
J. Vac. Sci. Technol. B **2**, 376 (1984)
- [Ch 86] Yia-Chung Chang, W. T. Masselink e H. Morkoç, D. C. Reynolds,  
C. W. Litton, K. K. Bajaj e P. W. Yu  
Solid State Elec. **29**, 205 (1986)
- [Ch 90] Yia-Chung Chang e G. T. Einevoll  
Phys Rev. B **41**, 1447 (1990)
- [Co 89] B. C. F. Colchesqui, P. D. Emmel, E. A. de Andrada e Silva e I. C. da Cunha Lima  
Phys. Rev. B **40**, 12513 (1989)
- [Dö 72] G. H. Döhler  
Phys. Status Solidi B **52**, 79 (1972)

- [Ef 79] A. L. Efros e B. I. Shklovskii  
*Electronic Properties of Doped Semiconductors*  
 Springer Verlag (1979)
- [Ef 85] A. L. Efros e B. I. Shklovskii  
*Coulomb Interactions in Disordered Systems with Localized Electronic States*  
 Capítulo 5 do livro *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems* de A. L. Efros e M. Pollak  
 Elsevier Science Publishers B. V. (1985)
- [Em 89] P. D. Emmel, E. A. de Andrada e Silva e I. C. da Cunha Lima  
 Phys. Rev. B **40**, 3394 (1989)
- [Em 91] P. D. Emmel, J. R. Leite e I. C. da Cunha Lima  
 Phys. Rev. B **43**, 9265 (1991)
- [Es 70] L. Esaki e R. Tsu  
 IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970)
- [Fl 52] S. Flügge e H. Marschall  
*Rechenmethoden der Quantentheorie*  
 Springer-Verlag, Berlin (1952)
- [Gh 89] A. Ghazali, A. Gold e J. Serre  
 Phys. Rev. B **39**, 3400 (1989)
- [Go 80] H. Goldstein  
*Classical Mechanics*  
 Addison-Wesley Publishing Company (1980)
- [Gr 80] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik  
*Table of Integrals, Series, and Products*  
 Academic Press, Inc. (1980)
- [Gr 83] R. L. Greene e K. K. Bajaj  
 Solid State Commun. **45**, 825 (1983)
- [Gr 85] R. L. Greene e K. K. Bajaj  
 Phys. Rev. B **31**, 913 (1985)

- [Gr 88] R. L. Greene e K. K. Bajaj  
Phys. Rev. B **37**, 4604 (1988)
- [Ja 67] J. D. Jackson  
*Classical Electrodynamics*  
John Wiley & Sons, Inc. (1967)
- [Ja 85] N. C. Jarosik, B. D. McCombe, B. V. Shanabrook,  
J. Comas, J. Ralston e G. Wicks  
Phys. Rev. Lett. **54**, 1283 (1985)
- [Ke 62] L. V. Keldish  
Sov. Phys. - Solid State **4**, 1658 (1962)
- [Ko 57] W. Kohn  
Solid. St. Phys. **5**, 257 (1957)
- [Ko 80] S. M. Kogan, N. V. Lien e B. I. Shklovskii  
Sov. Phys. JETP **51**, 971 (1980)
- [Ko 81] S. M. Kogan e N. V. Lien  
Sov. Phys. Semicond. **15**, 26 (1981)
- [La 73] D. M. Larsen  
Phys. Rev. B **8**, 535 (1973)
- [La 66] L. Landau e E. Lifchitz  
*Mécanique Quantique - Théorie non Relativiste*  
Éditions Mir, Moscou (1966)
- [Li 91] P. D. Emmel e I. C. da Cunha Lima  
Solid State Commun. **79**, 431 (1991)
- [Lu 55] J. M. Luttinger e W. M. Kohn  
Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [Ma 82] C. Mailhot, Y.-C. Chang e T. C. McGill  
Phys. Rev. B **26**, 4449 (1982)

- [Me 70] E. Merzbacher  
*Quantum Mechanics*  
John Wiley & Sons, Inc. (1970)
- [Mi 86] A. G. Milnes  
Solid State Electronics **29**, 99 (1986)
- [Ol 89] L. E. Oliveira e R. Pérez-Alvarez  
Phys. Rev. B **40**, 10460 (1989)
- [Pl 83] K. Ploog e G. H. Döhler  
Adv. in Phys. **32**, 285 (1983)
- [Ra 81] A. K. Ramdas e S. Rodriguez  
Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981)
- [Sh 79] B. I. Shklovskii, A. L. Efros e N. V. Lien  
J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 1869 (1979)
- [Sh 80] B. I. Shklovskii e A. L. Efros  
Sov. Phys. Semicond. **14**, 487 (1980)
- [Sh 87] B. V. Shanabrook  
Physica **146B**, 121 (1987)
- [Si 89] E. A. de Andrada e Silva e I. C. da Cunha Lima  
Phys. Rev. B **39**, 10101 (1989)