UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

"EFEITOS POLARONICOS EM
ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS EM
UMA E DUAS DIMENSÕES."

Francisco Ap. Pinto Osório

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física e
Química de São Carlos,
para obtenção do título de
mestre em Física Básica.

OK

USP / IFQ / 881

8-2-88/776

Orientador: Prof.Dr.Marcos H. Degani

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1988

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - 881
FÍSICA

334

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
FRANCISCO APARECIDO PINTO OSÓRIO APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 18 DE maio DE 1988.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Marcos Henrique Degani Orientador

Dr. Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira

Dr. Paulo Sergio Soares Guimarães

À

Diva e Aline e à
minha família,

Ao amigo Marcos H. Degani.

ÍNDICE

índice

Lista de figuras e tabelas

Agradecimentos

Publicações

Resumo

Abstract

Capítulo 0: Introdução geral

1

Primeira Parte: Magnetopolarons em heterojunções e poços quânticos de GaAs-AlGaAs

Capítulo 1: Introdução.

6

Capítulo 2: Desenvolvimento Teórico .

2.1. Cálculo do deslocamento de energia
dos níveis de Landau.

12

2.2. Magnetopolarons bidimensionais(2D).

18

2.2.a. Campo magnético fraco.

19

2.2.b. Campo magnético forte.

20

2.2.c. Campo magnético ressonante.

21

2.3. Magnetopolarons em poços quânticos e hetero-
junções de GaAs-AlGaAs.

28

2.3.a. Fatores de forma quase-bidimensionais.

29

2.3.b. Efeito da blindagem da interação elétron-
fonon LO.

38

2.3.c.Não parabolicidade da banda de condução do GaAs.	39

Capítulo 3: Comparação com os dados experimentais e conclusões.	44

Segunda Parte: Efeito polarônico sobre a energia de ligação
de uma impureza hidrogenóide em um fio
quântico quase unidimensional.

Capítulo 4: Introdução.	52

Capítulo 5: Desenvolvimento teórico e Resultados.	57

Capítulo 6: Conclusões	102

Referências:	104

LISTA DE FIGURAS E TABELAS

FIGURAS

- 2.1 Energia dos dois primeiros níveis de Landau na presença e na ausência da interação elétron-fonon LO como função do campo magnético.
- 2.2 Massa ciclotrônica como função do campo magnético na região abaixo da ressonância, para várias teorias de perturbação.
- 2.3 Massa ciclotrônica para um gás de elétrons bidimensional (2D) como função do campo magnético.
- 2.4 Representação de uma heterojunção de GaAs-AlGaAs
- 2.5 Comparação entre a massa ciclotrônica de um gás de elétrons 2D e quase bidimensional (Q2D) presente em uma heterojunção, para várias densidades eletrônicas.
- 2.6 Representação de um poço quântico de GaAs-AlGaAs
- 2.7 Comparação entre a massa ciclotrônica de um gás de elétrons 2D e quase bidimensional (Q2D) presente em uma heterojunção, para várias densidades eletrônicas.

2.8 Comparação entre os fatores de forma da heterojunção e do poço quântico.

2.9 Efeito da blindagem da interação elétron-fonon LO sobre a massa de ciclotron de um gás de elétrons 2D.

3.1 Comparação entre os resultados teóricos e experimentais para uma heterojunção com densidade eletrônica $N_s = 1,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e densidade de carga na camada de depleção $N_d = 0,42 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

3.2 Idem à 3.1 com $N_s = 3,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 0,27 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

3.3 Idem à 3.1 com $N_s = 4,07 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 2,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

3.4 Comparação entre os resultados teóricos e experimentais para um poço quântico com densidade eletrônica $N_s = 10^7 \text{ cm}^{-2}$.

5.1 Energia de ligação de uma impureza hidrogenóide colocada no centro de um fio quântico de GaAs-AlGaAs, com barreiras infinitas.

5.2 Energia de ligação em função de L_x para $L_y=100 \text{ Å}$ para três posições da impureza em um fio com barreiras infinitas.

5.3 Energia de ligação do estado fundamental de uma impureza hidrogenóide no centro de um fio quântico retangular com barreiras finitas, sem a presença da interação elétron-fonon LO,

para duas concentrações de alumínio.

5.4 Energia de ligação de uma impureza localizada no centro de um fio retangular, com $L_y=50$ angstroms, para várias concentrações de alumínio nas direções (X,Y) .

5.5 Energia de ligação em função das posições da impureza no fio, conforme esta se move ao longo da diagonal, para diferentes alturas das barreiras de potenciais.

5.6 Energia de ligação em função da concentração x para a concentração y fixa em dois valores para duas posições da impureza.

5.7 Energia de ligação do estado fundamental de uma impureza situada no centro de um fio quântico, com e sem a presença da interação elétron-fonon LO.

5.8 Energia de ligação para um fio com concentrações $x=y=0,3$ e $L_y=50$ angstroms, em função de L_x , com e sem a presença da interação elétron-fonon LO.

5.9 Energia de ligação para um impureza se deslocando na diagonal de um fio quântico, com e sem a contribuição polarônica.

5.10 Energia de ligação em função das concentrações $(x=y)$ com e sem a presença da interação elétron fonon LO, para dois fios com

diferentes tamanhos e posições da impureza.

5.11 Comparação entre os resultados para a energia de ligação, para as duas funções de onda da impureza, gaussiana e hidrogenóide unidimensional.

5.12 Comparação entre os resultados para a energia de ligação, para as duas funções de onda da impureza, gaussiana e hidrogenóide tridimensional.

5.13 Comparação entre os dois modelos para um fio com a impureza no centro e $x=y=0,3$.

5.14 Comparação entre os dois modelos para uma impureza se deslocando na diagonal de um fio quântico, para várias concentrações de alumínio.

5.15 Energia de ligação em função de L_x , para L_y fixo em três valores, para um fio com impureza no centro e $x=y=0,3$. Com e sem a contribuição polarônica, segundo modelo.

5.16 Energia de ligação em função de L_x , para L_y fixo em três valores, para um fio com impureza no centro e $x=y=0,15$. Com e sem a contribuição polarônica, segundo modelo.

5.17 Energia de ligação em função da posição da impureza conforme ela se desloca na diagonal de um fio para duas

concentrações diferentes, com e sem a presença dos fonons LO.

5.18 Energia de ligação como função das concentrações ($x=y$) para um fio com $L_x=L_y= 100$ angstroms e impureza no centro. Com e sem a interação elétron-fonon LO

TABELAS

2.1 Comparação dos efeitos polarônicos em 2D e 3D.

5.1 Comparação da energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO , para alguns tamanhos de fio.

5.2 Comparação da energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO , para algumas posições da impureza no fio.

5.3 Comparação da energia de ligação para fios quadrados com os resultados para fios cilíndricos, de mesma área de secção transversal.

5.4 Comparação da energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO , para alguns tamanhos de fios. Para a função gaussiana, segundo modelo.

5.5 Comparação da energia de ligação para fios quadrados com os resultados para fios cilíndricos, de mesma área de secção transversal. Segundo modelo.

Agradecimentos

Agradeço a todos aqueles que direta ou indiretamente colaboraram para a elaboração deste trabalho. Em especial:

Ao professor Dr. Oscar Hipólito por seu apoio e incentivo desde o início de nossas atividades.

Ao professor Abraham M. Cohen pelas produtivas discussões e pelo apoio.

A Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo auxílio financeiro.

PUBLICAÇÕES

" Bound impurity in GaAs-GaAlAs Quantum wires ", Francisco A.P.Osório, Marcos H.Degani and Oscar Hipólito, Physical Review B 37, 3, 1402 (1988)

" Magneto-Polaron in GaAs-GaAlAs heterostructure" ,F.A.P.Osório, M.H.Degani and O.Hipólito, in Proceedings of the Third Brazilian School on Semiconductor Physics, edited by O.Hipólito, G.E.Marques and A.Fazzio, World Scientific Publishing Co., Singapore (1987)

RESUMO

Neste trabalho estudamos os efeitos polarônicos sobre um gás de elétrons quase bidimensional presente em heteroestruturas semicondutoras (heterojunções e poços quânticos de GaAs-AlGaAs) sob a ação de um campo magnético uniforme aplicado na direção perpendicular à interface, através de teoria de perturbação de segunda ordem. Calculamos a massa ciclotrônica considerando a interação elétron-fonon LO e os efeitos de blindagem e não parabolicidade da banda de condução do GaAs. Os resultados obtidos são comparados com recentes dados experimentais de ressonância ciclotrônica e apresentam ótima concordância.

Estudamos também a energia de ligação do estado fundamental de uma impureza hidrogenóide localizada no interior de um fio quântico retangular de GaAs envolvido por AlGaAs, como função das dimensões do fio para várias alturas das barreiras de potenciais e posições da impureza, através de um método variacional, usando várias formas para a função de onda tentativa do sistema. Consideramos também a contribuição polarônica à energia de ligação. Comparamos nossos resultados com recentes cálculos da energia de ligação, efetuados por outros autores.

ABSTRACT

In this work we study the polaronic effects on the two dimensional electron gas present in semiconductor heterostructures (GaAs-AlGaAs heterojunctions and quantum wells) when a uniform magnetic field is applied perpendicular to the interface, using second order perturbation theory. By taking into account the effect of nonparabolicity and screening of the electron-phonon LO interaction the calculated effective mass is compared to the recent experimental data. Good agreement is found with available data.

The binding energies of a hydrogenic impurity located in quantum well wires of GaAs surrounded by AlGaAs are calculated as a function of the size of the wire for several values of the heights of the potential barriers and different positions of the impurity inside the wire. We follow a variational approach choosing several trial wave functions for the ground state. The polaronic contribution to the binding energy is considered. We compare our results with those previously obtained by other authors.

CAPITULO 0: INTRODUÇÃO GERAL

Desde a pioneira proposta de Esaki e Tsu [1] para a criação de super-redes semicondutoras, um grande número de trabalhos tem sido realizados visando o entendimento da natureza dos estados eletrônicos associados com super-redes, poços quânticos e heterojunções. Técnicas modernas de crescimento de cristais tais como Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e Deposição de Vapor Químico Organometálico (MOCVD) tem tornado possível a fabricação de sistemas de alta qualidade consistindo de camadas alternadas de dois semicondutores com controle sobre a espessura das camadas e interfaces abruptas entre elas.

As estruturas semicondutoras mais comumente estudadas são compostas de materiais dos grupos III-V e II-VI. Dentre essas as mais intensivamente estudadas são as heteroestruturas compostas de camadas alternadas de GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, onde x é a concentração de alumínio. Isso se deve ao excelente casamento das constantes de rede dos dois materiais ($\Delta a/a \sim 0.06\%$, $a = 5.6 \text{ \AA}$ GaAs) que permite a obtenção de interfaces abruptas e sem rugosidades. Além do mais ambos os semicondutores são de gap direto, sendo que a energia de gap do AlGaAs é maior que a do GaAs. Isso provoca uma descontinuidade da banda de condução ΔE_c que é igual à diferença entre as afinidades eletrônicas dos dois semicondutores. Essa descontinuidade do extremo da banda em heterointerfaces, obviamente comanda todas as propriedades eletrônicas dos poços quânticos, heterojunções e super-redes. Para os parâmetros fundamentais ΔE_c e ΔE_v (descontinuidades das

bandas de condução e valência), as qualidades preditas em muitos modelos teóricos não são satisfatórias, o que requer que esses parâmetros sejam determinados experimentalmente. Experimentos recentes [3] reviram os valores anteriormente aceitos [2] de $\Delta E_c / \Delta E_g = 0.85$ e $\Delta E_v / \Delta E_g = 0.15$ para 0.60 e 0.40 respectivamente, onde ΔE_g é a descontinuidade da energia de gap.

Particularmente se em uma heterojunção de AlGaAs-GaAs o material da barreira (AlGaAs) é dopado com impurezas doadoras enquanto o GaAs é mantido puro (dopagem modulada), os elétrons fornecidos pelas impurezas irão se alojar no material de gap menor, o GaAs, ficando confinados por um poço de potencial unidimensional próximos à interface dos dois semicondutores. Este poço de potencial é originado pela diferença de gap entre os dois materiais e pelas impurezas doadoras no AlGaAs.

A presença desse potencial quantiza o movimento eletrônico na direção normal à interface em subbandas, que são dinamicamente bidimensionais (2D), desde que os elétrons são praticamente livres para se moverem no plano paralelo à interface, mas possuem seu movimento quantizado na direção normal à interface. Pelo mesmo processo de dopagem modulada podemos ter a presença do gás de elétrons quase bidimensional em poços quânticos isolados e super redes, que são compostas pela superposição de heterojunções.

Essas estruturas bidimensionais são caracterizadas por intrigantes fenômenos nunca antes observados no volume (bulk) de semicondutores. Um exemplo importante é que essas estruturas exibem altas mobilidades eletrônicas, devido à separação espacial

entre os elétrons e as impurezas doadoras, diminuindo assim o espalhamento elástico. Também a presença de impurezas ionizadas tem atraído muita atenção, porque o confinamento espacial beneficia em muito a interação coulombiana originando energias de ligação mais altas que as encontradas no volume do semicondutor.

Outro fato interessante é que os materiais dos grupos III-V e II-VI são fracamente polares. E em semicondutores polares o movimento eletrônico é acompanhado do campo de polarização dos fonons longitudinais ópticos (LO) formando a quase partícula chamada de polaron. Os efeitos desse acoplamento (efeitos polarônicos) se manifestam diminuindo a energia do elétron por uma quantidade correspondente à energia de ligação do polaron e aumentando sua massa efetiva.

Mais recentemente o elevado grau de desenvolvimento nas técnicas de crescimento de cristais tem tornado possível a fabricação de estruturas semicondutoras quase unidimensionais (Q1D). Pesquisadores [4] usando MBE e fotolitografia associadas com processos de corrosão química cresceram fios quânticos de GaAs envolvidos por AlGaAs, com secção de área da ordem de 10^4 angstroms quadrados e de vários centímetros de comprimento. Nessas estruturas o gás de elétrons comporta-se como Q1D tendo seu movimento livre ao longo do comprimento do fio e quantizado nas duas direções normais a ele. A presença de uma impureza hidrogenóide em um fio quântico de GaAs-AlGaAs foi considerada por vários autores. A importância do confinamento eletrônico em estruturas 2D, sugere que efeitos mais dramáticos ocorram quando a impureza é colocada em um meio Q1D. A energia de ligação da

impureza deverá ser maior que aquelas encontradas em estruturas 2D, devido ao confinamento adicional do elétron. Também aqui a interação elétron-fonon LO, efeito polarônico, deverá atuar dando uma contribuição significativa para a energia de ligação da impureza.

Este trabalho se divide em duas partes, sendo que em cada uma delas tratamos de problemas distintos. Na primeira parte deste trabalho tratamos da interação elétron-fonon LO sobre um gás de elétron quase-bidimensional (Q2D) presente em poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs. Reproduzimos a situação experimental considerando a presença de um campo magnético uniforme aplicado na direção normal à interface, que quantiza o movimento eletrônico no plano paralelo à interface em níveis de Landau. Dessa maneira o gás de elétrons é totalmente quantizado de modo que os efeitos polarônicos podem ser observados em experimentos de Ressonância ciclotrônica (RC), através da dependência da massa de ciclotron com o campo magnético.

Os três primeiros capítulos que seguem tratam deste assunto. No capítulo 1, temos uma breve introdução ao estudo dos magnetopolarons (polarons em campos magnéticos), onde de maneira sucinta discutimos suas propriedades e alguns trabalhos mais importantes a eles dedicados. No capítulo 2, desenvolvemos toda a teoria do problema, obtendo através da teoria de perturbação de segunda ordem a expressão do deslocamento da energia dos níveis de Landau devido ao efeito polarônico, para um gás de elétrons Q2D, considerando a blindagem da interação elétron-fonon LO devido à presença de outros elétrons. Inferimos o valor da massa

efetiva do magnetopolaron através da transição entre os níveis $n=0$ e $n=1$ de Landau. Na sequência estudamos o limite para o gás de elétrons 2D e obtemos importantes resultados qualitativos. Então estudamos o efeito da largura finita do gás de elétrons e efeitos da blindagem da interação elétron-fonon LO considerando efeitos de ocupação dos níveis de Landau.

Finalmente tratamos as bandas de condução do GaAs como não parabólicas deixando nossa teoria em condições de ser comparada com os resultados experimentais. No capítulo 3 é que fazemos essa comparação.

Na segunda parte deste trabalho calculamos a energia do estado fundamental de um elétron ligado a uma impureza hidrogenóide situada no interior de um fio quântico de GaAs envolvido por AlGaAs. Consideramos o fio como tendo secção de área transversal retangular e calculamos a energia de ligação em função das dimensões do fio para várias alturas das barreiras de potenciais e posições da impureza no fio. Avaliamos também a contribuição polarônica para a energia de ligação, que é obtida através de um método variacional supondo vários modelos diferentes para a função de onda do sistema.

Nossos resultados para as energias de ligação dos variados modelos são comparados entre si e com resultados teóricos de outros autores para fios retangulares e cilíndricos. No capítulo 4 fazemos uma breve introdução, relatando os estudos feitos por vários autores para fios quânticos. No capítulo 5 desenvolvemos a teoria e as comparações descritas acima. Nossas conclusões são apresentadas no capítulo 6.

CAPITULO 1:INTRODUÇÃO

Sistemas eletrônicos quase-bidimensionais tem sido amplamente estudados nos últimos anos, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Tais sistemas estão presentes em estruturas de metal-óxido-semicondutor(MOS) e em heteroestruturas semicondutoras, que são de grande interesse tecnológico. Elétrons nesses sistemas são dinamicamente bidimensionais, desde que eles são praticamente livres para se moverem paralelamente à interface, mas estão ligados na direção perpendicular por um potencial eletrostático.

As estruturas semicondutoras mais comumente estudadas são compostas de materiais dos grupos III-V e II-VI, que são fracamente polares. Como exemplo podemos ter poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs e MOS de InSb ou CdHgTe. Em tais materiais os elétrons polarizam a rede e o acoplamento do elétron com o campo de polarização auto-induzido dos fonons longitudinais ópticos(LO) chama-se polaron. O acoplamento elétron-fonon LO é medido em termos da constante adimensional α de Frolich, definida como

$$\alpha = \frac{e^2}{2\hbar W_{LO}} \left[\frac{\hbar}{2m_b W_{LO}} \right]^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \quad (1)$$

onde ϵ_∞ e ϵ_0 são as constantes dielétricas do material para altas e baixas frequências, m_b é a massa de banda do elétron, $\hbar W_{LO}$ é a energia do fonon LO e "e" é a carga do elétron.

Para os materiais destes dois grupos o acoplamento elétron-

fonon LO é fraco no sentido que $\alpha \ll 1$; por exemplo, para o GaAs $\alpha=0.068$ e para o InSb $\alpha=0.02$. Assim sendo podemos obter os efeitos polarônicos através da teoria de perturbação de segunda ordem, que é exata para $\alpha \rightarrow 0$.

Em experimentos de ressonância ciclotrônica (RC), um campo magnético B uniforme é aplicado à amostra na direção perpendicular à interface, quantizando o movimento eletrônico no plano paralelo à interface em níveis de Landau. A energia do n -ésimo nível de Landau é

$$E_n = (n+1/2) \hbar \omega_c \quad (2)$$

onde $\omega_c = eB/m_b c$ é a frequência de ciclotron e c a velocidade da luz.

A interação elétron-fonon LO (efeito polarônico) desloca a energia dos níveis de Landau por uma quantidade ΔE_n correspondente à energia de ligação do magnetopolaron, provocando também a renormalização da massa do elétron para um valor ligeiramente diferente. Resultados de RC para p-InSb[5], CdHgTe[6] e heteroestruturas de AlGaAs-GaAs mostram a existência do efeito polarônico através da dependência da massa de ciclotron com o campo magnético B .

Para pequenos campos magnéticos ($\omega_c \ll \omega_{LO}$) o crescimento da massa de ciclotron é uma função quase linear com o crescimento do campo magnético. Em semicondutores como o GaAs a não-parabolicidade das bandas de condução também provoca um crescimento quase linear da massa de ciclotron com B .

Consequentemente na região onde $\omega_c \ll \omega_{LO}$ os dois efeitos não podem ser separados.

Os efeitos polarônicos se tornam mais proeminentes na região próxima à ressonância $\omega_c = \omega_{LO}$ e o crescimento da massa é mais rápido que o crescimento quase linear provocado pela não parabolicidade, deste modo os dois efeitos podem ser separados com facilidade. Nessa região a interação elétron-fonon LO desloca a degenerescência entre o nível n de Landau e o nível $n=0$ mais um fonon LO real, dando origem à separação ressonante da energia E_n em dois ramos que nunca cruzam o nível de energia $E_{p,n} = \hbar\omega_c/2 + \hbar\omega_{LO} + \Delta E_0$, onde ΔE_0 é o deslocamento do nível $n=0$ devido ao efeito polarônico. No limite de grandes campos ($\omega_c \gg \omega_{LO}$) a energia E_n tenderá à energia $E_{p,n}$, que é chamada de energia limitante.

As transições possíveis entre dois níveis de Landau são determinadas através de um parâmetro adimensional ν , definido como o número de elétrons dividido pelo número de estados dentro dos níveis de Landau. Desprezando-se o spin do elétron, o fator de preenchimento pode ser expresso por

$$\nu = N_e \pi l^2 \quad (4)$$

onde l é o raio da órbita de Landau ($l^2 = \hbar c / eB$) e N_e a densidade eletrônica. Se $\nu \ll 1$ somente transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$ são possíveis à temperatura $T=0$. Essa região onde $\nu \ll 1$ é conhecida como limite quântico, onde os efeitos polarônicos se manifestam com maior intensidade. Por isso usualmente em RC se medem

transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$ de Landau da subbanda mais baixa e se infere o valor da massa efetiva do magnetopolaron através da relação

$$m^* = eBh \frac{1}{c [E_1 - E_0]} \quad (5)$$

onde E_n é a energia do nível n de Landau perturbado pela interação elétron-fonon LO.

A investigação dos efeitos polarônicos em sistemas eletrônicos quase-bidimensionais(Q2D) tem sido alvo de muita atenção nos últimos anos. Das Sarma [7] estudou os efeitos da interação elétron-fonon LO sobre um gás de elétrons estritamente bidimensional(2D) e obteve a massa de ciclotron, para as transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$, em função do campo magnético B , nas regiões de campos fracos, fortes e ressonantes. Através da teoria de perturbação de Rayleigh-Schrodinger (RSPT); Larsen [8], num trabalho subsequente, reviu os resultados de Das Sarma e acrescentou à teoria efeitos de ocupação dos níveis de Landau. Estes dois últimos trabalhos foram generalizados por Peeters e Devreese[9] para níveis de Landau arbitrários. Estes autores realizaram seus cálculos usando uma versão improvisada da teoria de perturbação de Wigner-Brillouin(WBPT), que os levou ao valor correto de $E_{p,n}$.

Os cálculos para os sistemas eletrônicos estritamente bidimensionais (2D) predizem que os efeitos polarônicos são aumentados quando comparados com os mesmos efeitos nos sistemas tridimensionais (3D). Esse fato foi atribuído ao confinamento

espacial dos portadores. No entanto os resultados experimentais não confirmam por completo essa previsão. Experimentos de RC em p-InSb realizadas por Horst e outros[5] constataram o aumento dos efeitos polarônicos quando comparados àqueles do volume do InSb. Entretanto vários experimentos de RC para heterojunções de GaAs-AlGaAs [10-14] estão em contraste com esses resultados e indicam que em heterojunções os efeitos polarônicos são reduzidos em relação aos do volume do GaAs.

Lassnig e Zawadzki [15] estudaram os efeitos da interação elétron-fonon LO em MOS de p-InSb, considerando o gás de elétrons quase-bidimensional e a forte não parabolicidade das bandas do InSb. Estes cálculos descrevem bem quantitativamente os dados de Horst e outros[5] e conclui-se que os efeitos de muitos corpos não são importantes neste material. Esta é a diferença essencial com a heterojunção de GaAs-AlGaAs, onde os efeitos de blindagem são importantes e responsáveis pela atenuação dos efeitos polarônicos quando comparados aos do volume do GaAs. Isso se deve à grande concentração de portadores presentes em heterojunções, superior em quatro ou cinco ordens de magnitude às concentrações típicas de sistemas 3D.

Peeters e outros[16] e Xiaoguang e outros [17] numa série de trabalhos tem usado o formalismo da função memória para o cálculo do espectro de RC de polarons Q2D em heterojunções de AlGaAs-GaAs. Nestes cálculos os efeitos de blindagem e da não parabolicidade das bandas de condução do GaAs são considerados. Estes resultados teóricos estão em boa concordância com os resultados experimentais de Hopkins e outros [13] na região do

limite quântico e observa-se que para densidades $N_s > 1,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, a massa efetiva do magnetopolaron é menor do que a correspondente para o volume do GaAs.

Neste trabalho estudaremos os efeitos polarônicos sobre um gás de elétrons quase-bidimensional presente em poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs, considerando efeitos de blindagem da interação elétron-fonon LO através da constante dielétrica estática calculada na aproximação RPA (Random phase approximation). No cálculo da blindagem o efeito de ocupação dos níveis de Landau é levado em conta. Tratamos as bandas do GaAs como não parabólicas e calculamos o deslocamento da energia dos níveis de Landau, através da teoria de perturbação de segunda ordem, discutindo os vários tipos de teorias de perturbação que podem ser utilizadas no problema.

Este trabalho é organizado da seguinte forma: no capítulo 2 deduzimos a expressão para o deslocamento da energia dos níveis de Landau para um gás de elétrons Q2D. Analisamos detalhadamente o limite estritamente 2D, obtendo as principais características qualitativas do sistema analiticamente. Na sequência apresentamos os fatores de forma para heterojunções e poços quânticos, estudando seus efeitos sobre o gás de elétrons 2D. Então incorporamos a blindagem e a correção à energia dos níveis de Landau devido à não parabolicidade das bandas de condução do GaAs. No capítulo 3 comparamos nossos resultados com os resultados experimentais.

CAPÍTULO 2: DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

2.1) Cálculo do deslocamento da energia dos níveis de Landau devido ao efeito polarônico

Vamos considerar uma heterojunção composta de GaAs-AlGaAs, na qual somente a subbanda mais baixa está populada pelos elétrons. A interface entre os dois materiais coincide com o plano $Z=0$ e os elétrons estão confinados na região $Z>0$ no lado do GaAs. A hamiltoniana de um elétron interagindo com os fonons longitudinais ópticos (LO) do GaAs na presença de um campo magnético B uniforme aplicado na direção perpendicular à interface (direção Z), pode ser escrita na forma:

$$H = H_0 + H_I \quad (1)$$

onde H_0 é a hamiltoniana não perturbada de um elétron sob a ação de um campo magnético mais a hamiltoniana do sistema de fonons LO,

$$H_0 = H_{01} + H_{02} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} \quad (2)$$

com

$$H_{01} = \frac{P_x^2}{2m_b} + \frac{1}{2} m_b \omega_c^2 (x - K_y l^2) \quad (3)$$

$$H_{02} = \frac{P_z^2}{2m_b} + V(Z) \quad (4)$$

onde $l^2 = (\hbar c / eB)$ é o raio da órbita de Landau, $\omega_c = (eB / m_b c)$ é a frequência de ciclotron, sendo m_b a massa de banda do elétron no GaAs. $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ e $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z)$ são o momento e o vetor de onda do elétron. $b_\omega (b_\omega)$ são os operadores de criação (destruição) dos fonons LO, com vetor de onda $\vec{Q} = (q, q_z)$ e frequência ω_{LO} . O potencial $V(Z)$ é o potencial eletrostático que confina o movimento eletrônico na direção Z.

H_I é a hamiltoniana de interação entre os elétrons e os fonons LO e é dada por

$$H_I = \sum_{\vec{Q}} V_Q \left(e^{-i \vec{Q} \cdot \vec{R}} b_Q^\dagger + e^{i \vec{Q} \cdot \vec{R}} b_Q \right) \quad (5)$$

onde V_Q é o potencial de interação elétron-fonon LO,

$$V_Q = -i \frac{\hbar \omega_{LO}}{|\vec{Q}| \epsilon(q)} \left[\frac{4\pi\alpha}{V} \left(\frac{\hbar}{2m_b \omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

com α e V a constante de acoplamento elétron-fonon LO e o volume do sistema, respectivamente, e $\epsilon(q)$ a função dielétrica responsável pela blindagem da interação elétron-fonon LO devido à presença de outros elétrons.

Na presença de um campo magnético uniforme as subbandas são quantizadas em níveis de Landau no plano paralelo à interface, de modo que nosso sistema é totalmente quantizado. A interação elétron-fonon LO (o efeito polarônico) desloca a energia dos níveis de Landau pela quantidade ΔE_n , de modo que a energia total do nível n é dada por

$$E_n = \epsilon_n + \Delta E_n \quad (7)$$

No regime de acoplamento fraco $\alpha \ll 1$, podemos tratar o problema através da teoria de perturbação de segunda ordem. Assim o deslocamento da energia devido ao efeito polarônico é obtida da expressão:

$$\Delta E_n = - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|M_{nm}(\vec{Q})|^2}{D_{nm}} \quad (8)$$

onde

$$M_{nm}(\vec{Q}) = \langle \Psi_{m, K_y - q_y} | H_I | \Psi_{n, K_y} \rangle \quad (9)$$

é o elemento de matriz da interação elétron-fonon LO entre os autoestados da hamiltoniana não perturbada H_0 , que são

$$| \Psi_{n, K_y} \rangle = | n, K_y, \xi(Z); 0 \rangle \quad (9a)$$

onde $|n\rangle$ é a função de onda de um oscilador harmônico simples com o centro deslocado pela quantidade $x = K_y l^2$, $|K_y\rangle = e^{i K_y y}$ é a função de onda do elétron livre na direção Y e $\xi(Z)$ a função de onda eletrônica na direção normal à interface. O estado $|0\rangle$ denota a ausência dos fonons LO. O denominador D_{nm} na equação (8) é

$$D_{nm} = \hbar \omega_{LO} - \Delta_n - (\epsilon_n - \epsilon_m) \quad (10)$$

onde $\epsilon_n - \epsilon_m$ é a diferença entre as energias dos níveis de Landau n e m. Se tomarmos as bandas de condução do GaAs como parabólicas teremos

$$E_n - E_m = (n-m) \hbar \omega_c \quad (11)$$

O termo Δn do denominador depende da teoria de perturbação a ser usada. Como discutido por Lindemann e outros[18], podemos obter várias teorias de perturbação de acordo com a escolha de Δn . Fazendo $\Delta n=0$ teremos a teoria de perturbação de Rayleigh-Schrodinger, RSPT, se $\Delta n = \Delta E_n$ temos a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin, WBPT, e obtemos a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin improvisada, IWBPT, fazendo $\Delta n = \Delta E_n - \Delta E_0$. Adiamos a discussão sobre as conveniências de cada teoria de perturbação para o item 2.2, para que possamos concluir a dedução da expressão de ΔE_n , que é importante para uma discussão a esse respeito.

De volta à equação (8), podemos calcular o elemento de matriz $M_{nm}(\vec{Q})$, de modo que teremos

$$\Delta E_n = - \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\vec{Q}} \frac{|V_0|^2 |V_{nm}(\vec{Q})|^2 [F(Z)]^2}{D_{nm}} \quad (12)$$

onde

$$V_{nm}(Q) = \int \psi_n(x - k_y l^2 + q_y l^2) e^{-i q_x x} \psi_m(x - k_y l^2) dx \quad (13)$$

$$F(Z) = \int_0^{\infty} \xi^*(z) e^{-i q_z z} \xi(z) dz \quad (14)$$

Realizando a integração em x na equação (13), chegamos ao seguinte resultado

$$V_{nm}(Q) = \left[\frac{n_2!}{m_1!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{2} q_x q_y l^2} e^{\frac{q_z^2 l^2}{4}} \left[\frac{l}{\sqrt{2}} (q_y - i q_x) \right]^{n_2 - n_1} L_{m_2}^{n_1 - n_2} (q^2 l^2 / 2) \quad (15)$$

onde n_1 e n_2 denotam respectivamente o valor mínimo e o valor máximo entre os índices n e m , ou seja, $n_2 = \min(n, m)$ e $n_1 = \max(n, m)$, $\vec{q} = (q_x, q_y)$ é o vetor de onda bidimensional dos fonons LO e L_n^K é o polinômio associado de Laguerre.

Substituindo a equação (15) na equação (12) e somando sobre q_z , obtemos

$$\Delta E_n = - \frac{2\pi\alpha}{A} (\hbar\omega_{LO})^2 r_p \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\vec{q}} \frac{F(\vec{q}) |V_{nm}(\vec{q})|^2}{\epsilon(\vec{q}) [\hbar\omega_{LO} - \Delta_n - (E_n - E_m)] q} \quad (16)$$

com

$$F(\vec{q}) = \int_0^{\infty} dz \int_0^{\infty} dz' |\xi(z)|^2 \frac{e^{-q|z-z'|}}{e} |\xi(z')|^2 \quad (17)$$

o fator de forma, que leva em consideração a dimensionalidade do sistema na direção Z . Dessa expressão podemos ver que se $|\xi(Z)|^2 = \delta(Z)$ então $F(\vec{q})=1$, ou seja, no caso em que o sistema é estritamente bidimensional e o gás de elétrons tem espessura nula na direção normal à interface. Temos ainda o raio do polaron $r_p = (\hbar/2m_b\omega_{LO})^{\frac{1}{2}}$ e A é a área do cristal. Passando a equação (16) para a forma integral e tornando-a adimensional em relação às unidades polarônicas, o que corresponde a escrevermos as energias em unidades de $\hbar\omega_{LO}$ e os comprimentos em unidades do raio do polaron r_p , chegaremos à expressão;

$$\Delta E_n = - \alpha \int_0^{\infty} \frac{d\mu}{\epsilon^2(\mu)} e^{-\frac{\mu^2}{\lambda^2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n_2!}{n_1!} \left[\frac{\mu^2}{\lambda^2} \right]^{n_1 n_2} \frac{F(\mu) \{ L_{n_2}^{n_1 n_2} (\mu^2/\lambda^2) \}^2}{1 - \Delta_n - \frac{(E_n - E_m)}{\hbar\omega_{LO}}} \quad (18)$$

para o deslocamento da energia dos níveis de Landau, devido à interação elétron-fonon LO, para um sistema eletrônico quase-

bidimensional(Q2D). Na expressão (18) usamos ainda a notação:
 $\lambda^2 = \omega_c / \omega_{Lo}$, $u = q \cdot r_p$ e $F(u)$ é o fator de forma em unidades polarônicas.

Tradicionalmente em experimentos de ressonância ciclotrônica (RC), considera-se transições entre os dois primeiros níveis de Landau $n=0$ e $n=1$ da subbanda mais baixa e mede-se a frequência de ressonância ciclotrônica

$$\omega_c^* = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \omega_c + \frac{\Delta E_1 - \Delta E_0}{\hbar} \cdot (\hbar \omega_{Lo}) \quad (19)$$

O efeito polarônico desloca a frequência de ciclotron do seu valor não perturbado ω_c da quantidade

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E_1 - \Delta E_0}{\hbar} \cdot (\hbar \omega_{Lo}). \quad (20)$$

Esse deslocamento é interpretado como uma variação da massa efetiva do polaron m^* , isto é,

$$\frac{m^*}{m_b} = \frac{\omega_c}{\omega_c^*} \quad (21)$$

ou melhor, da equação (19) temos

$$m^* = m_b \left[1 + \frac{\Delta E_{CR}}{\lambda^2} \right]^{-1} \quad (22)$$

onde

$$\Delta E_{CR} = \Delta E_1 - \Delta E_0 \quad (22a)$$

Se $\Delta E_{cr} < 0$, teremos um crescimento da massa efetiva do magnetopolaron em relação à massa efetiva de banda m_b .

Vamos a seguir considerar um caso especial para a solução da equação (18), que consiste em considerarmos o gás de elétrons como estritamente bidimensional(2D), sem blindagem ($\epsilon(q)=1$) e as bandas do GaAs como parabólicas, assim a variação da massa de ciclotron obtida será exclusivamente devido ao efeito polarônico.

2.2) Magnetopolarons bidimensionais(2D)

Para estudar o limite estritamente bidimensional a extensão finita da função de onda do elétron na direção Z será desconsiderada, de modo que $F(u)=1$. Ainda para facilitar os cálculos não consideraremos efeitos de blindagem da interação elétron fonon LO fazendo $\epsilon(q)=1$ e trataremos as bandas do GaAs como parabólicas. Com essas suposições a equação (18) para o deslocamento de energia dos níveis de Landau, será dada por

$$\Delta E_n = -\alpha \int_0^\infty du e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}} \sum_{m=0}^\infty \frac{n_2!}{n_1!} \left[\frac{u^2}{\lambda^2} \right]^{n_1-n_2} \frac{\{L_{n_2}^{n_1-n_2}(u^2/\lambda^2)\}^2}{1-\Delta_n - (n-m)\lambda^2} \quad (23)$$

Para começar uma revisão das propriedades qualitativas dos magnetopolarons bidimensionais como função do campo magnético, faremos $\Delta n=0$ na equação (23) o que corresponde à teoria de perturbação de Rayleigh-Schrodinger. Consideraremos separadamente três diferentes regiões de interesse físico, que são os regimes de campos magnéticos fracos, fortes e ressonantes.

2.2.a) Campos magnéticos fracos ($\omega_c \ll \omega_{Lo}$)

Na região de campos fracos ($\lambda^2 \ll 1$), o denominador $[1 - (n-m)\lambda^2]$ será sempre positivo, de modo que podemos fazer a transformação

$$\frac{1}{1 - (n-m)\lambda^2} = \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{e^{-t(n-m)\lambda^2}} \quad (24)$$

que inserida na equação (23) resulta na expressão

$$\Delta E_n = -\alpha \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n_2!}{n_1!} \int_0^\infty du \frac{e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}}}{e^{\frac{u^2}{\lambda^2}}} \left[\frac{u^2}{\lambda^2} \right]^{n_1-n_2} \left\{ L_{n_2}^{n_1-n_2} \left(\frac{u^2}{\lambda^2} \right) \right\}^2 \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{e^{-t(n-m)\lambda^2}} \quad (25)$$

As correções ΔE_n para os dois primeiros níveis de Landau $n=0$ e $n=1$, que entram no cálculo da massa de ciclotron, são obtidas da equação (25) como

$$\Delta E_0 = -\alpha \int_0^\infty du \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{e^{-\frac{u^2}{\lambda^2} (1 - e^{-t\lambda^2})}} \quad (26)$$

$$\Delta E_1 = -\alpha \int_0^\infty du \int_0^\infty dt \frac{e^{-t(1-\lambda^2)}}{e^{-\frac{u^2}{\lambda^2} (1 - e^{-t\lambda^2})}} \left[\frac{u^2}{\lambda^2} (e^{-t\lambda^2} - 1) + e^{-t\lambda^2} \right] \quad (27)$$

Realizando as integrações, teremos

$$\Delta E_1 = -\alpha \left[\frac{\pi}{8\lambda} \frac{\Gamma(1/\lambda^2 - 1)}{\Gamma(1/\lambda^2 + 1/2)} + \frac{\pi}{2\lambda} \frac{\Gamma(1/\lambda^2)}{\Gamma(1/\lambda^2 + 1/2)} \right] \quad (28)$$

$$\Delta E_0 = -\alpha \left[\frac{\pi}{2\lambda} \frac{\Gamma(1/\lambda^2)}{\Gamma(1/\lambda^2 + 1/2)} \right] \quad (29)$$

onde $\Gamma(X)$ é a função gama de X . No caso em que $\lambda^2 \ll 1$, podemos expandir as funções gama em termos de $1/\lambda^2$, para $\lambda^2 \rightarrow 0$. Assim

$$\Delta E_{CR} = - \frac{\pi\alpha}{8} \left[1 + \frac{9}{8} \lambda^2 \right] \quad (30)$$

substituindo esses resultados na expressão para a massa efetiva m^* , equação (22), temos

$$m^* = m_b \left[1 + \frac{\pi\alpha}{8} + \frac{9\pi\alpha \lambda^2}{64} \right] \simeq m_p \left[1 + \frac{9\pi\alpha \lambda^2}{64} \right] \quad (31)$$

onde $m_p = m_b(1 + \pi\alpha/8)$ é a massa do polaron 2D na ausência de algum campo magnético aplicado. No limite de campos extremamente fracos ($\lambda^2 \rightarrow 0$) a massa de ciclotron se aproxima da massa do polaron a campo nulo.

2.2.b) Campos magnéticos fortes ($\lambda^2 \gg 1$)

Na região de campos fortes ($\lambda^2 \gg 1$) a contribuição dominante para a equação (23) é do termo diagonal. Assim desprezando os termos com ($n \neq m$) a equação (23) pode ser reescrita da forma

$$\Delta E_n = -\alpha \int_0^\infty du e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}} \left[L_n^0(u^2/\lambda^2) \right]^2 \quad (32)$$

dessa equação, calculamos os deslocamentos de energia para os níveis $n=0$ e $n=1$ e obtivemos a massa efetiva dada pela relação

$$m^* = m_b \left[1 - \frac{\sqrt{\pi} \alpha}{2 \lambda} \right] \quad (33)$$

Como podemos observar existem diferenças importantes entre os resultados de campos fortes e fracos. Para campos fortes no limite de $\lambda^2 \rightarrow \infty$, a massa de ciclotron aproxima a massa de banda do elétron no GaAs. Isso quer dizer que para campos magnéticos tais que $\omega_c > \omega_{Lo}$ a polarização da rede não consegue mais acompanhar o elétron que oscila muito mais rapidamente que os modos ópticos da rede. Por outro lado a campos fracos quando ω_c tende a zero, a massa de ciclotron se aproxima da massa renormalizada do polaron 2D sem campo aplicado.

Há uma mudança de sentido da correção polarônica sobre a massa do elétron antes e depois da ressonância ($\omega_c = \omega_{Lo}$). A campos fracos a correção polarônica age no sentido de aumentar a massa de banda do elétron m_b , enquanto que a campos fortes ela diminui a massa efetiva para valores abaixo de m_b . Outra diferença entre os dois resultados é que a campos fortes a correção na massa efetiva é proporcional a $1/\sqrt{B}$, enquanto a campos fracos ela é linear com B.

2.2.c) Campo magnético ressonante ($\omega_c = \omega_{Lo}$)

É claro da discussão anterior que a natureza da correção polarônica para a massa efetiva do elétron muda qualitativamente à medida que a frequência de ciclotron ω_c passa da região de campos fracos para a região de campos fortes. Portanto a região da ressonância ($\lambda^2 = 1$) deve ser tratada com muito cuidado a

começar pela teoria de perturbação.

Na ressonância ($n\lambda^2=1$) o nível de energia n é degenerado com o nível de energia $n=0$ mais um fonon LO real ($\lambda^2/2 + 1$), sendo que a interação elétron-fonon LO, remove essa degenerescência originando uma separação ressonante da energia E_n em dois ramos.

Na figura 2.1 mostramos as propriedades das energias dos níveis de Landau $n=0$ e $n=1$ na presença (linhas contínuas) e na ausência (linhas tracejadas) da interação elétron-fonon LO como função do campo magnético B . Podemos notar da figura o cruzamento dos níveis e a separação ressonante da energia E_1 em dois ramos um superior (E_1^+) e outro inferior (E_1^-). Quando $\omega_c < \omega_{LO}$ o ramo inferior de E_1 tem a intensidade dominante de oscilador e é interpretado como o pico de ressonância ciclotrônica que origina a massa $m^* > m_b$. Para $\omega_c > \omega_{LO}$ muito da intensidade de oscilador é transferida para o ramo superior que é agora interpretado como o pico de ressonância ciclotrônica que origina a massa $m^* < m_b$ e aproxima a massa m_b no limite de campos infinitamente grandes [19,20].

Na região ressonante devemos usar outras teorias de perturbação para o cálculo do deslocamento de energia ΔE_n , que tratem corretamente a degenerescência dos níveis. Se fizermos $\Delta n = \Delta E_n$ na equação (23), teremos a teoria de perturbação de Wigner- Brillouin (WBPT). Essa teoria de perturbação ainda não é a mais adequada, pois na região de altos campos magnéticos a energia E_1 como vemos da figura tende ao valor $(1 + \lambda^2/2 + \Delta E_0)$, que é o valor correto da energia limitante, enquanto que a WBPT

limita a energia E_n ao valor $(1+\lambda^2/2)$.

Figura 2.1: Energia dos dois primeiros níveis de Landau $n=0$ e $n=1$ na presença (linhas contínuas) e na ausência (linhas tracejadas) da interação elétron-fonon LO como função do campo magnético B . Próximo do campo ressonante onde $\omega_c = \omega_{LO}$ a energia E_1 se separa em dois ramos E_1^+ e E_1^- . As setas indicam as transições com maior probabilidade.

A teoria de perturbação de Wigner-Brillouin improvisada (IWBPT) é obtida pela escolha de $\Delta n = \Delta E_n - \Delta E_0$, onde a correção ao nível $n=0$ é calculada pela RSPT, desde que não há contribuição ressonante para esse nível. Os resultados obtidos com o uso da IWBPT são muito bons para toda a extensão do campo magnético para $\alpha \ll 1$. Os cálculos da figura 2.1 foram feitos dentro da IWBPT;

notem o correto valor da energia limitante $(1 + \frac{\lambda^2}{2} + \Delta E_0)$ sendo aproximado pelo ramo inferior de E_1 na região onde $\omega_c \rightarrow \infty$.

Figura 2.2: Massa ciclotrônica como função do campo magnético quando $\omega_c < \omega_{L0}$ para várias teorias de perturbação. No limite de $\omega_c \rightarrow 0$ temos $m^* \rightarrow m_p$, a massa do polaron 2D sem campo aplicado.

O comportamento da massa de ciclotron (m^*/m_b) como função do campo magnético (W_c/W_{Lo}) na região abaixo da ressonância para um gás de elétrons estritamente bidimensional (2D) é mostrada na figura 2.2 para as várias teorias de perturbação discutidas. Utilizamos em nossos cálculos numéricos os parâmetros físicos do GaAs, $\alpha = 0.068$ e $m_b = 0.066 m_0$ com m_0 a massa do elétron livre. Podemos notar que na região próxima à ressonância a massa calculada pela RSPT cresce abruptamente, mas na região de campos fracos seus resultados estão bem próximos dos da IWBPT. Como vemos comparados com as outras teorias os resultados da WBPT subestimam o valor da massa efetiva do polaron. Na figura mostramos o limite de $W_c \rightarrow 0$, $m^* \rightarrow m_p = 0,0678 m_0$.

Utilizaremos a IWBPT para examinar o que acontece com a massa ciclotrônica na região ressonante. Nessa região teremos dois valores para a massa efetiva do magnetopolaron, correspondendo à separação ressonante de E_1 em dois ramos. A contribuição dominante quando $\lambda^2 = 1$ para o deslocamento de energia dado na equação (23) é a do termo $m=0$. Assim podemos escrever, desprezando a contribuição dos demais termos ($m \neq 0$),

$$\Delta E_n = - \frac{\alpha \lambda}{1 - \Delta n - n \lambda^2} \frac{\Gamma(n + 1/2)}{2 n!} \quad (34)$$

Fazendo $\Delta n = \Delta E_n - \Delta E_0$ (IWBPT) e resolvendo-se a equação de segundo grau resultante temos

$$\Delta E_n = \frac{\Delta E_0}{2} \pm \left[\left(\frac{\Delta E_0}{2} \right)^2 + \frac{\alpha \lambda (2n-1)!!}{2^{n+1} n!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (35)$$

portanto

$$\Delta E_L = \frac{\Delta E_0}{2} \pm \left[\left(\frac{\Delta E_0}{2} \right)^2 + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{4} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (36)$$

logo

$$\Delta E_{cR} = -\frac{\Delta E_0}{2} \pm \left[\left(\frac{\Delta E_0}{2} \right)^2 + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{4} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (37)$$

substituindo essa expressão na equação (21) temos

$$m_z^* = m_b \left\{ 1 + \frac{\Delta E_0}{2} \mp \left[\left(\frac{\Delta E_0}{2} \right)^2 + \frac{\alpha \sqrt{\pi}}{4} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (38)$$

Desprezando-se o deslocamento ΔE_0 , reobtemos os resultados de Das Sarma [7]

$$m_z^* = m_b \left\{ 1 \mp \frac{\sqrt{\alpha} \pi^{\frac{1}{4}}}{2} \right\} \quad (39)$$

Na figura 2.3 mostramos a variação da massa de ciclotron com o campo magnético (ω_c/ω_{Lo}). Nesta figura podemos observar os limites de campos fracos e fortes, assim como a separação ressonante da massa. Os cálculos foram feitos para o gás de elétrons 2D usando-se a teoria de perturbação IWBPT.

Os efeitos polarônicos são consideravelmente aumentados em sistemas eletrônicos bidimensionais (2D), quando comparados com os do volume (bulk) do GaAs. Isso é intuitivamente entendido como uma consequência do confinamento espacial do movimento eletrônico

na direção Z. A falta de uma regra de seleção para os vetores de onda na direção Z dos elétrons e fonons permite que fonons com arbitrários q_z participem do processo de interação, ou seja, um número maior de fonons participa do processo de interação com os elétrons em 2D do que em 3D.

Figura 2.3: Massa ciclotrônica para um sistema eletrônico estritamente 2D como função do campo magnético (ω_c/ω_{Lo}). Nos limites não ressonantes $\omega_c \ll \omega_{Lo}$ e $\omega_c \gg \omega_{Lo}$ obtemos a massa renormalizada do polaron 2D sem campo aplicado e a massa de banda do elétron no GaAs, respectivamente.

Na tabela 2.1 os efeitos polarônicos para sistemas 2D são resumidos e comparados com efeitos correspondentes em 3D. Como vemos a renormalização da massa, a energia de ligação do polaron e a separação ressonante dos níveis são mais pronunciados em 2D.

	2D	3D	2D/3D
Energia de ligação do polaron	$-\frac{\pi\alpha}{2}\hbar\omega_{LO}$	$-\alpha\hbar\omega_{LO}$	$\frac{\pi}{2} \sim 1,57$
Renormalização da da massa	$\frac{\pi\alpha}{8}m_b$	$\frac{\alpha}{6}m_b$	$\frac{3\pi}{4} \sim 2,4$
Polaron ressonante [$(m^*_e-m^*_p)/m_b$]	$\pi^{1/4}\sqrt{\alpha}$	$2^{1/3}\alpha^{2/3}$	$\alpha^{-1/6}$

Tabela 2.1: Comparação entre os efeitos polarônicos em 2D e 3D.

Considerar o gás de elétrons como estritamente 2D é apenas uma idealização, pois em sistemas reais há uma determinada espessura da camada eletrônica que não é desprezível e tem de ser levada em consideração. No próximo item levamos em consideração tal fato e discutimos outros efeitos relevantes como a blindagem da interação elétron-fonon LO e a não parabolicidade das bandas do GaAs.

2.3.Magnetopolarons em poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs

Na secção anterior vimos que os efeitos polarônicos são maiores em sistemas 2D do que em 3D. Embora consistente com nossa intuição esse resultado está em contradição com resultados experimentais para heterojunções de AlGaAs-GaAs [10-14], que reportam que as correções polarônicas em sistemas 2D reais são menores que aqueles para o volume do GaAs. Essa diferença entre os resultados experimentais e a simples teoria desenvolvida anteriormente se deve a fatores como a extensão finita da função de onda eletrônica na direcção Z e a efeitos de blindagem da interacção elétron-fonon LO. Esses efeitos sózinhos não são suficientemente fortes para atenuar os efeitos polarônicos em sistemas 2D, de modo que eles sejam mais fracos que em sistemas 3D. No entanto a conjugação dos dois efeitos é forte o suficiente para fazê-lo.

2.3.a) Fatores de Forma quase-bidimensionais

No caso puramente bidimensional nós impusemos que a função de onda do elétron na direcção normal à interface satisfizesse à relação

$$|\psi(Z)|^2 = \delta(Z) \quad (40)$$

e o fator de forma $F(q)$ definido pela equação (17) era idêntico à unidade. Portanto os elétrons estavam confinados em uma camada de extensão infinitamente estreita na direcção Z. Consideraremos

agora a extensão finita da camada eletrônica na direção normal à interface; neste caso teremos $F(q) < 1$. Da equação (18) é claramente visível que ΔE_n diminuirá de seu valor 2D.

Para o cálculo do fator de forma $F(q)$, usaremos duas formas diferentes para $\xi(Z)$, correspondentes a duas heteroestruturas similares, poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs. No caso de uma heterojunção o gás de elétrons quase-bidimensional (Q2D) está confinado na região $Z > 0$ no lado do GaAs, sendo que o AlGaAs ocupa o plano $Z < 0$ e a interface a posição $Z = 0$; na figura 2.4 mostramos uma representação dessa heterojunção. O potencial unidimensional confinante é obtido através da expressão

$$V(Z) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \int_0^Z dz' \int_0^{z'} dz'' \rho(z'') + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} N_d \cdot Z \quad (41)$$

onde $\rho(Z)$ é a densidade eletrônica e N_d é a densidade de cargas na camada de depleção.

Para a função de onda real $\xi(Z)$, usamos uma aproximação variacional supondo que a barreira de potencial na interface seja tão grande que $\xi(Z)$ se anule na região $Z < 0$. Uma conveniente função variacional para o estado fundamental do sistema é aquela de Fang e Howard [21],

$$\xi(Z) = \left[\frac{b^3}{2} \right]^{\frac{1}{2}} z e^{-bz/2} \quad (42)$$

que é comprovadamente [22] adequada para a heterojunção de AlGaAs-GaAs. O parâmetro variacional b está associado com a extensão

Z_0 de $\xi(Z)$ pela relação $b=3/Z_0$. O fator de forma é facilmente calculado substituindo $\xi(Z)$ na equação (18). Temos assim

$$F(q) = \frac{1}{8} \left[1 + \frac{q}{b} \right]^{-3} \left[8 + q \cdot \frac{q}{b} + 3 \left(\frac{q}{b} \right)^2 \right] \quad (43)$$

Como esperado $F(q) \rightarrow 1$ se $Z_0=0$, ou seja, $b \rightarrow \infty$, corresponde ao limite 2D.

Figura 2.4: Representação de uma heterojunção de GaAs-AlGaAs; as cargas + representam as impurezas doadoras.

O parâmetro b é obtido minimizando-se a energia total da subbanda mais baixa, que é uma expressão analítica conhecida [21], b é dado por

$$b^3 = \left[\frac{48 \pi m_b e^2 N^*}{\epsilon_0 \hbar^2} \right] \quad (44)$$

onde N^* é a densidade efetiva de carga dada pela relação

$$N^* = N_d + \frac{11}{32} N_s \quad (45)$$

sendo N_d a densidade de carga na camada de depleção e N_s a densidade eletrônica.

Na figura 2.5 mostramos o efeito do fator de forma $F(q)$ dado pela equação (43) sobre o gás de elétrons 2D para várias densidades eletrônicas. Quanto maior a densidade N_s menor o efeito de atenuação do fator de forma e mais 2D é o sistema. Para um mesmo campo magnético aplicado o efeito do fator de forma da heterojunção diminui com aumento da densidade.

Prosseguindo vamos considerar agora que o gás de elétrons Q2D está confinado na camada de GaAs em um poço quântico de $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$, onde x denota a concentração de alumínio. Na figura 2.6, abaixo, mostramos um esquema de nossa segunda heteroestrutura.

Figura 2.6. Representação de um poço quântico de $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$.

Figura 2.5: Comparação entre a massa ciclotrônica do gás de elétrons 2D e Q2D presente em uma heterojunção de GaAs-AlGaAs para várias densidades eletrônicas. O efeito de atenuação da massa devido ao fator de forma diminui com o aumento da densidade eletrônica.

Os elétrons localizam-se na subbanda mais baixa do poço quântico de extensão L_z no GaAs e são confinados pelo potencial $V(Z)$, devido à diferença de gap entre os dois semicondutores definido por

$$V(Z) = \begin{cases} V_0 & |Z| > L_z/2 \\ 0 & |Z| < L_z/2 \end{cases} \quad (46)$$

onde V_0 é a altura da barreira de potencial que é obtida das concentrações de alumínio como sendo de 60% do valor da descontinuidade da energia de gap ΔE_g , definida como

$$\Delta E_g = (1040 x + 470 x^2) \text{ meV} \quad (47)$$

A função de onda do estado fundamental do poço quântico unidimensional é

$$\psi(Z) = \begin{cases} [B \cos(K_1 L_z/2) e^{\kappa_2 L_z/2}] e^{\kappa_2 Z} & Z < -L_z/2 \\ B \cos(K_1 Z) & |Z| < L_z/2 \\ [B \cos(K_1 L_z/2) e^{-\kappa_2 L_z/2}] e^{-\kappa_2 Z} & Z > L_z/2 \end{cases} \quad (48)$$

onde

$$B = \left[\frac{1}{K_2} \cos^2(K_1 L_z/2) + \frac{1}{2K_1} \sin K_1 L_z + \frac{L_z}{2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (49)$$

$$K_1 = \sqrt{\frac{2m_b E}{\hbar^2}} \quad K_2 = \sqrt{\frac{2m_2 (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (50)$$

sendo $m_2 = (m_b + 0.083m_0x)$ a massa do elétron no AlGaAs e m_b a massa eletrônica de banda no GaAs.

Os parâmetros K_1 e K_2 são determinados da maneira usual, de modo a satisfazerem as condições de continuidade e conservação da corrente nas interfaces do poço. Desta forma temos a relação a ser satisfeita,

$$m_b K_2 = m_2 K_1 \operatorname{tg}(K_1 L_z / 2) \quad (51)$$

Substituindo-se a expressão para $\psi(Z)$ dada pela equação (48) na equação (18), podemos calcular o fator de forma para o poço quântico. Depois de muitos cálculos chegamos à expressão

$$\begin{aligned} F(q) = & \frac{4B^4 \cos^2(K_1 L_z / 2) e^{-\frac{qL_z}{2}} A_1}{(2K_2 + q)(q^2 + 4K_1^2)} + \frac{2B^4 \cos^4(K_1 L_z / 2) e^{-qL_z}}{(2K_2 + q)^2} \\ & + \frac{B^4 \cos^4(K_1 L_z / 2)}{K_2 (2K_2 + q)} + \frac{2K_1^2 B^4}{q(q^2 + 4K_1^2)} \left[L_x + \frac{\operatorname{sen} 2K_1 L_z}{K_1} \right] \\ & + \frac{2qB^4}{q^2 + 4K_1^2} \left[\frac{3L_z}{8} + \frac{\operatorname{sen}(K_1 L_z)}{2K_1} + \frac{\operatorname{sen}(2K_1 L_z)}{16K_1} \right] \\ & + \frac{2B^4 A_1 e^{-\frac{qL_z}{2}}}{q^2 + 4K_1^2} \left[K_1 \operatorname{sen}(K_1 L_z) + \frac{2K_1^2 - q}{q} \cos(K_1 L_z / 2) \right] \quad (52) \end{aligned}$$

com

$$A_1 = 2K_1 \operatorname{sen} K_1 L_z \cosh \frac{qL_z}{2} + \operatorname{senh} \frac{qL_z}{2} \left[\frac{4K_1^2}{q} + 2q \cos^2 \frac{K_1 L_z}{2} \right] \quad (53)$$

Na figura 2.7 podemos observar o efeito do fator de forma do poço quântico sobre a massa de ciclotron (m^*/m_b) do gás de elétrons 2D. Como esperado quanto mais estreito for o poço menor o efeito do fator de forma, mais 2D é o sistema. Para o mesmo campo magnético aplicado o efeito de $F(q)$ é maior quanto maior for L_z .

Uma comparação entre os fatores de forma para heterojunções e poços quânticos é mostrada na figura 2.8. Para $L_z = Z_0 = 22 \text{ \AA}$, $F(q)$ do poço quântico é mais eficiente em reduzir os efeitos polarônicos; a situação se inverte para $L_z = 100 \text{ \AA}$.

Figura 2.8: Comparação entre os fatores de forma de uma heterojunção e de um poço quântico de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, com $x=0,36$.

Figura 2.7: Comparação entre a massa de ciclotron como função do campo magnético, para o gás de elétrons 2D e Q2D localizado em um poço quântico de GaAs-Al_{0,34}Ga_{0,66}As. A atenuação dos efeitos polarônicos, devido ao fator de forma, diminui com a diminuição de L_z .

2.3.b) Efeito da blindagem da interação elétron-fonon LO

Aqui estudaremos os efeitos da blindagem da interação elétron-fonon LO sobre um gás de elétrons estritamente 2D. A constante dielétrica estática $\epsilon(u)$ obtida dentro da aproximação RPA, para um sistema eletrônico Q2D sob a ação de um campo magnético B uniforme [23], é dada pela seguinte expressão: para $\nu < 1$ ela é igual a

$$\epsilon(u) = 1 + \frac{4m_b e^2}{\hbar^2 \epsilon_0} \frac{F(u)}{\mu} \quad \nu F_0(u^2/\lambda^2) \quad (54)$$

onde

$$F_0(a) = e^{-a} \int_0^a dx \frac{e^x - 1}{x} \quad (55)$$

e para $1 < \nu < 2$ temos,

$$\epsilon(u) = 1 + \frac{4m_b e^2}{\hbar^2 \epsilon_0} \frac{F(u)}{\mu} \left\{ F_0(u^2/\lambda^2) + (\nu-1) \left[F_1(u^2/\lambda^2) - \frac{\mu^2}{\lambda^2} e^{-\frac{\mu^2}{\lambda^2}} \right] \right\} \quad (56)$$

com

$$F_1(a) = (1 - e^{-a}) + (1-2a)F_0(a) + \frac{a^2}{e^a} \int_0^\infty dx \frac{e^{-x} - 1 - x}{x^2} \quad (57)$$

Como vemos no cálculo de $\epsilon(u)$ levamos em consideração o fato que os elétrons obedecem a estatística de Fermi-Dirac, através do fator de preenchimento .

Com a introdução da blindagem a expressão para ΔE_n será dividida por $\epsilon^2(u) \neq 1$, e o efeito da blindagem como pode ser visto da

figura 2.9, é o de atenuar os efeitos polarônicos (atenuação essa que é maior quanto maior a densidade eletrônica). Para uma mesma densidade N_s quanto maior mais efetiva é a blindagem e para o mesmo campo magnético aplicado o efeito da blindagem é o inverso do efeito do fator de forma da heterojunção, ou seja, cresce com a densidade.

A teoria do magnetopolaron 2D adicionamos então a blindagem da interação elétron-fonon LO e a extensão finita de $\xi(Z)$. De forma a compararmos nossos resultados teóricos com os dados experimentais devemos tratar a não parabolicidade das bandas de condução do GaAs e é isso que fazemos a seguir.

2.3.c) Não parabolicidade das bandas de condução do GaAs

As correções à energia dos elétrons devido à não parabolicidade (NP) das bandas de condução do material são calculadas usando-se o método k.p de Kane. Neste tipo de cálculo Palik e outros [24], considerando a interação entre três bandas, derivaram a seguinte relação para a energia da banda não parabólica,

$$D_n = D_n^0 \left[1 - \delta_2 \frac{D_n^0}{E_g} \right] \quad (58)$$

onde

$$D_n^0 = (n+1/2) \hbar W_c + E_{cz} \quad (59)$$

é a energia total do elétron no nível n de Landau, com E_{cz} a

energia cinética na direção Z, que para a heterojunção vale $\hbar^2 b^2 / 8m_b$ e para o poço de potencial temos $\hbar^2 K_1^2 / 2m_b$.

Figura 2.9: Efeito da blindagem da interação elétron-fonon LO sobre a massa de ciclotron de um gás de elétrons 2D.

O coeficiente δ_2 aparecendo na equação (58) é determinado pela estrutura de bandas do material e é definido como

$$\delta_2 = \frac{1 + x_1^2/2}{1 + x_1/2} (1 - y_1)^2 \quad (60)$$

onde

$$x_1 = (1 + \Delta / E_g)^{-1}$$

e

$$y_1 = m_b / m_0$$

sendo E_g a energia de gap do GaAs e Δ a separação das bandas de valência devido à interação spin-órbita. Os cálculos originais para o modelo de três bandas dão o valor de $\delta_2 = 0.83$ para o GaAs. No entanto cálculos recentes que incluíram contribuições de cinco bandas concluem que a não parabolicidade é maior e valores de δ_2 entre 1.1 [25] e 1.5 [25.a] foram encontrados para o GaAs no limite de baixas energias.

A energia da transição do nível $n-1$ para o n -ésimo nível de Landau considerando as bandas como não parabólicas é dada por

$$\hbar \omega_c^* = \hbar \omega_c \left[1 - \frac{2\delta_2}{E_g} (n \hbar \omega_c - E_{c2}) \right] \quad (61)$$

Como vemos a não parabolicidade também desloca a frequência de ciclotron provocando uma renormalização da massa de banda do elétron para uma massa efetiva dada por

$$m^* = m_b \left[1 - \frac{2\delta_2}{E_g} (n \hbar \omega_c - E_{c2}) \right]^{-1} \quad (62)$$

O crescimento da massa de ciclotron é quase linear com o campo magnético na região de baixa energia. Portanto para campos fracos ambos os efeitos, o polarônico e o de não parabolicidade, se confundem não sendo possível distingui-los nessa região.

Ao calcularmos a correção de energia ΔE_n devido ao efeito polarônico, devemos fazê-lo considerando as bandas do GaAs como não parabólicas. Para isso suporemos que a não parabolicidade não afeta a hamiltoniana básica de Frohlich, que descreve a interação elétron-fonon LO. Nosso modelo é que a não parabolicidade afeta nossa hamiltoniana apenas mudando a energia do elétron D_n^0 para a energia dada na expressão (58).

Assim nossa expressão para ΔE_n será

$$\Delta E_n = -\alpha \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n_2!}{n_1!} \int_0^{\infty} \frac{du e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}} F(u)}{\xi^2(u)} \left[\frac{u^2}{\lambda^2} \right]^{n_1 n_2} \frac{\left[L_{n_2} \left(\frac{u^2}{\lambda^2} \right) \right]^2}{1 - \Delta n - W_{nm}} \quad (63)$$

que é a mesma que a equação (18) e somente trocamos a diferença de energia entre os níveis de Landau n e m por sua versão não parabólica

$$W_{nm} = (n-m) \lambda^2 \left[\frac{1 - \delta_2 (\lambda^2 + 2E_{c2})}{E_g} \right] - (n^2 - m^2) \frac{\lambda^4 \delta_2}{E_g} \quad (64)$$

onde $E_g = E_g / \hbar \omega_{LO}$ e $E_{c2} = E_{c2} / \hbar \omega_{LO}$.

Sendo assim em nossos cálculos numéricos usamos as seguintes expressões para as energias dos níveis de Landau $n=0$ e $n=1$

$$\Delta E_0 = -\alpha \int_0^\infty du \int_0^\infty dt e^{-t} \frac{F(u)}{\varepsilon^2(u)} e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}(1-e^{-\lambda^2 t})} \quad (65)$$

$$e \quad \Delta E_1 = -\alpha \left\{ \int_0^\infty du \int_0^\infty dt e^{-t} \frac{F(u)}{\varepsilon^2(u)} S + \int_0^\infty du e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}} \frac{F(u) (u^2/\lambda^2)}{\varepsilon^2(u) [1 - \lambda^2 \gamma - \Delta_1]} \right\} \quad (66)$$

$$S = \left\{ e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}(1-e^{-\lambda^2 t})} \left[1 + \frac{u^2}{\lambda^2} \frac{(\bar{e}^{-\lambda^2 t} - 1)^2}{\bar{e}^{-\lambda^2 t}} \right] - \frac{u^2}{\lambda^2} \frac{e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}}}{\bar{e}^{-\lambda^2 t}} \right\} \quad (66a)$$

para o cálculo da massa de ciclotron. Nas equações acima temos

$$\gamma = \left[\frac{1 - \frac{\delta_2}{\varepsilon_0} (\lambda^2 + 2 \varepsilon_{cz})}{\varepsilon_0} \right] \quad (67)$$

Em resumo, neste capítulo obtivemos a expressão para o deslocamento da energia dos níveis de Landau devido ao efeito polarônico, para um gás de elétrons Q2D na presença de um campo magnético uniforme. Estudamos o limite estritamente 2D obtendo as principais características qualitativas do sistema. Os efeitos da extensão finita da função de onda eletrônica na direção normal à interface sobre o gás de elétrons 2D foram considerados para poços quânticos e heterojunções de GaAs-AlGaAs. Também a blindagem da interação elétron-fonon LO foi incluída em nossa teoria através de uma constante dielétrica obtida pela aproximação RPA para um gás de elétrons Q2D na presença de um campo magnético. Outro efeito que incluímos em nossos cálculos foi a não parabolicidade das bandas de condução do GaAs.

No próximo capítulo nossos resultados teóricos para a massa de ciclotron serão comparados com os dados experimentais.

CAPITULO 3: COMPARAÇÃO COM OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E CONCLUSÕES

Temos avaliado numericamente as expressões para os deslocamentos de energia ΔE_0 e ΔE_1 dadas nas equações (65) e (66) do capítulo anterior para poços quânticos e heterojunções de AlGaAs-GaAs e inferido o valor da massa efetiva da relação

$$m^* = m_b \left[1 + \Delta_{NP} + \frac{\Delta E_{CR}}{\lambda^2} \right]^{-1} \quad (1)$$

onde $\Delta_{NP} = -2\delta_2(\lambda^2 + \epsilon_{c2})/E_g$, é a contribuição da não parabolicidade (NP) para o crescimento da massa de ciclotron. Para os cálculos numéricos tomamos os parâmetros físicos que são típicos para heteroestruturas de GaAs. O fator de preenchimento é dado pela relação

$$\nu = \frac{N_s \times 10^{-12}}{\lambda^2} \quad (2)$$

com a densidade eletrônica N_s em unidades de 10^{12} cm^{-2} . A constante de acoplamento de Frohlich, a constante dielétrica estática e a energia do fonon LO do volume do GaAs valem respectivamente 0.068, 12.8 e 36.77 meV. Para a energia de gap tomamos $E_g = 1520 \text{ meV}$. A massa de banda do elétron no GaAs é desconhecida bem como o coeficiente δ_2 , por isso deixaremos esses parâmetros livres e determinaremos seus valores ajustando nossos resultados teóricos com os resultados experimentais.

Figura 3.1: Massa de ciclotron como função do campo magnético B para uma heterojunção de AlGaAs-GaAs com densidades $N_s = 1,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 0,42 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. As cruzes são os dados experimentais, nossos resultados teóricos na presença e na ausência (NP) da interação elétron-fonon LO estão representados pelas linhas contínuas, para $m_b = 0,066 m_0$ e $\delta_2 = 1$; m_0 é massa do elétron livre.

Na figura 3.1 vemos a variação da massa de ciclotron (m^*/m_0) em função do campo magnético B (Tesla) para uma heterojunção de AlGaAs-GaAs com uma densidade eletrônica $N_B = 1,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e com uma carga na camada de depleção $N_d = 0,42 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Os pontos experimentais (cruzes) foram obtidos em experimentos de RC por Hopkins e outros [13]. Obtemos uma boa concordância entre teoria e experiência ajustando $m_b = 0,066 m_0$ e $\delta_2 = 1$. Os efeitos polarônicos são evidentes na figura 3.1, desde que a não parabolicidade (NP) sózinha (linha tracejada) produz um aumento da massa de ciclotron apenas linear com o campo magnético B .

No caso desta primeira amostra a densidade eletrônica é baixa o suficiente para que todos os pontos experimentais estejam no limite quântico ($\nu < 1$). Em particular temos $\nu = 1$ para $B = 2,94 \text{ T}$.

Para densidades eletrônicas maiores, onde a baixos campos magnéticos $\nu > 1$, outros níveis de Landau além do $n=0$ poderão ser ocupados por elétrons e transições entre os níveis $n \rightarrow n+1$ com $n > 0$ podem ocorrer, complicando consideravelmente o problema e neste caso nossa simples teoria não deverá dar bons resultados.

Na figura 3.2 comparamos nossos resultados teóricos com os experimentais de Hopkins e outros [13] para uma heterojunção de AlGaAs-GaAs com $N_B = 3,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 0,275 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Tomamos os valores de m_b e δ_2 como determinados para a primeira amostra de densidade mais baixa, de modo que não há parâmetros de ajuste. Como esperado há uma boa concordância na região em que $\nu < 1$. Quando $1 < \nu < 2$ o segundo nível de Landau estará parcialmente preenchido e transições entre os níveis $n=1$ e $n=2$ também são

possíveis além das de $n=0$ para $n=1$. Da figura podemos ver que nesta região nossos resultados subestimam o valor da massa de ciclotron.

Figura 3.2: Idem à figura 3.1, só que para uma amostra com densidades maiores $N_s = 3,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 0,275 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Na figura 3.3 mostramos os resultados experimentais obtidos por Horst e outros [12] para uma amostra com $N_e = 4.07 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Neste caso em particular a densidade eletrônica na camada de depleção não foi medida experimentalmente, de modo que nós a usamos como um fator de ajuste entre as curvas. A concordância entre a teoria e os dados de Horst como pode ser notado da figura está um pouco aquém do esperado. Determinamos $N_d = 2.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para a nossa melhor curva e encontramos boa concordância somente para $B > 12,5 \text{ T}$, enquanto que para a densidade em questão $\gamma = 1$ para $B = 8,54 \text{ tesla}$. A diferença entre este caso e os comparados anteriormente é atribuída à má qualidade da amostra de Horst, que possuía uma mobilidade dez vezes menor que a de Hopkins.

Recentemente Singleton e outros [26] realizaram experimentos de RC em um estreito (22 Å) poço quântico composto de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com concentração de alumínio $x = 0,36$. O poço não foi dopado com impurezas de modo que a baixas temperaturas as subbandas eletrônicas estavam despovoadas de elétrons. Com iluminação contínua obteve-se uma densidade eletrônica no poço estimada em 10^7 cm^{-2} . Os resultados para a massa de ciclotron em função da energia ($\hbar\omega_c$) são comparados com os nossos na figura 3.4. Como a densidade é muito baixa os efeitos de blindagem da interação elétron-fonon LO são desprezíveis e somente o fator de forma Q2D é que será o responsável pela atenuação dos efeitos polarônicos em relação ao caso 2D. Assim o valor da massa de ciclotron no poço estará próximo àquele para o volume do GaAs e não estará abaixo dos valores 3D como ocorria para as amostras anteriores.

Figura 3.3: Idem à figura 3.1, para uma amostra com $N_s = 4.07 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 2.40 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Neste caso N_d foi usado como parâmetro de ajuste, pois não foi determinado experimentalmente.

Boa concordância entre experimento e teoria é obtida para $m_b = 0.066 m_0$ e $\delta_2 = 0.95$. Como vemos para o mesmo valor de m_b , o parâmetro δ_2 é menor no poço quântico do que na heterojunção. Neste capítulo nossos resultados teóricos foram comparados com os dados experimentais de ressonância ciclotrônica para heteroestruturas de GaAs-AlGaAs. Encontramos boa concordância entre os resultados teóricos e experimentais na região do limite quântico, onde $\gamma < 1$. Isso porque nesta região ocorrem somente transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$. Determinamos para heterojunções o valor da massa de banda do elétron ($m_b = 0,066 m_0$) e do coeficiente ($\delta_2 = 1$) da amostra de mais baixa densidade eletrônica, para a qual todos os pontos experimentais estavam na região de $\gamma < 1$ e o ajuste entre os dois resultados foi ótimo.

Para o poço quântico, usamos o valor de m_b determinado para heterojunções e determinamos $\delta_2 = 0,95$, um valor menor que o encontrado para heterojunções. Aqui também o ajuste entre as curvas foi muito bom. Concluimos então que a não parabolicidade das bandas de condução para heterojunções é maior que no poço quântico e que ambas são maiores que no volume do GaAs.

Figura 3.4: Variação da massa de ciclotron com a energia ($\hbar\omega_c$) para um gás de elétrons Q2D em um poço quântico com largura $L_z=22 \text{ \AA}$. Os dados experimentais ($\bar{x}$) são de Singleton e outros, para uma densidade eletrônica de 10^7 cm^{-2} . Nossos resultados teóricos (linhas cheias) são para $\delta_2=0.95$ e $m^* = 0.066 m_0$.

CAPITULO 4:INTRODUÇÃO

Com os recentes avanços na técnica de crescimento de cristais tais como M.B.E tem sido possível a fabricação de sofisticadas estruturas semicondutoras, tais como fios ultra finos de GaAs envolvidos por AlGaAs cujas dimensões são da ordem de submicrons. Em tais estruturas quase-unidimensionais os elétrons podem mover-se livremente ao longo do comprimento do fio(direção Z), mas possuem seu movimento quantizado nas duas direções normais ao fio (direções X e Y). Sakaki[27] foi o primeiro a investigar as propriedades de transporte dos elétrons confinados em fios quânticos de GaAs envolvido por $Al_xGa_{1-x}As$, e a mostrar que essas estruturas suprimiam com muita eficiência o espalhamento elástico por impurezas ionizadas, possibilitando altas mobilidades eletrônicas. Depois Petroff e outros[4], motivados pelo trabalho de Sakaki, fabricaram fios ultra finos usando estes materiais e reportaram algumas propriedades de luminescência que parecem ser específicas dos fios quânticos de pequenas dimensões.

Recentemente muitos trabalhos teóricos têm sido feitos com a finalidade de entender as propriedades de elétrons e buracos em tais estruturas quase-unidimensionais (Q1D). Por exemplo, Degani e Hipólito[28] calcularam os efeitos da interação dos elétrons e buracos com os fonons ópticos sobre a energia de ligação de éxcitons e mostraram que a correção polarônica é significativa. Lee e Spector[29] e Lee e Vassel[30] investigaram a mobilidade de elétrons espalhados por doadores ionizados, bem como por fonons

ópticos e acústicos. Também a absorção óptica devido às transições diretas inter-subbandas foram estudadas[40]. Num cálculo recente Chitta e Marques[31] obtiveram as dispersões das subbandas de valência e condução ao longo do eixo de um fio quântico de GaAs-AlGaAs. Eles mostraram a presença de um forte acoplamento entre as subbandas de valência e condução neste sistema.

Um dos problemas cruciais na física de semicondutores e particularmente nessas novas estruturas quase-unidimensionais é a presença de impurezas ionizadas que desempenham um papel fundamental nos mecanismos de transporte a baixas temperaturas. Os estados eletrônicos associados às impurezas são hidrogenóides como aqueles encontrados nos problemas de impurezas em estruturas semicondutoras bidimensionais. No entanto, devido ao confinamento adicional do elétron em fios quânticos a energia de ligação será aumentada para valores superiores àqueles encontrados em poços quânticos bidimensionais.

Alguns autores têm investigado os vários aspectos dos níveis de energia de impurezas em sistemas quase-unidimensionais. Lee e Spector [32] calcularam a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide colocada sobre o eixo de um fio quântico cilíndrico de barreiras infinitas e mostraram que o valor da energia de ligação do estado fundamental era bem maior que os valores para duas e três dimensões, conforme o raio do fio era reduzido. De fato a energia de ligação no limite unidimensional é infinita [33].

Posteriormente, Bryant[34] estudou um fio quântico

cilíndrico de barreiras finitas e encontrou que no limite em que o raio tende à zero, a energia não diverge, e tende ao valor tridimensional. Os cálculos prévios foram feitos com a impureza no eixo do fio, enquanto que é bem conhecido que impurezas fora do eixo desempenham um papel fundamental nas propriedades ópticas de sistemas quase bidimensionais. Sendo assim Brum[35] calculou as energias de ligação de uma impureza hidrogenóide em um fio quântico retangular, acrescentando o fato que a impureza podia estar em várias posições dentro do fio. Entretanto neste cálculo as alturas das barreiras de potenciais são infinitas.

Algum tempo depois Bryant[36], com o intuito de estudar o efeito da forma geométrica escolhida para o fio sobre a energia de ligação também calculou a energia de ligação de uma impureza em um fio quântico retangular de barreiras infinitas. Comparando seus resultados para fios cilíndricos e quadrados ele estabeleceu que fios com áreas da secção transversal idênticas possuíam energias de ligação aproximadamente iguais. A diferença entre os resultados para as diferentes geometrias com áreas iguais da secção reta foi atribuída ao fato de que o confinamento é maior em certas direções em uma geometria do que em outra.

Os cálculos citados anteriormente foram realizados para fios cilíndricos com alturas das barreiras de potenciais finitas e infinitas e para fios retangulares com barreiras infinitas. Um dos motivos de se escolher a forma cilíndrica para o fio quântico é que nesta geometria os cálculos são mais fáceis de serem efetuados, desde que a equação de Schrodinger que descreve o movimento do elétron no poço de potencial normal ao

fio é separável permitindo a determinação analítica das funções de onda do elétron no poço não perturbado. Do mesmo modo ocorre para fios retangulares com barreiras de potenciais infinitas. Nesse caso em particular o estado fundamental do poço retangular não perturbado, sem a presença da impureza, é descrito exatamente [37] como a sobreposição dos estados fundamentais de dois poços unidimensionais independentes um em cada direção de quantização.

Nenhum cálculo que seja do nosso conhecimento foi realizado para fios retangulares reais com alturas finitas das barreiras de potenciais. O motivo para isso é que o potencial que descreve o poço de confinamento normal ao fio não é separável. Isso causa grandes transtornos, porque as funções de onda que descrevem o movimento do elétron no poço retangular não perturbado não podem ser obtidas analiticamente.

No capítulo 5 a seguir, calculamos a energia de ligação de um elétron no estado fundamental de um fio quântico retangular de GaAs envolvido por AlGaAs, ligado à uma impureza hidrogenóide. Consideramos o efeito da interação do elétron com os fonons logitudinais ópticos (LO) do volume do GaAs, efeito polarônico, sobre a energia de ligação.

Usamos o método variacional para o cálculo da energia de ligação, escolhendo formas distintas para a função de onda tentativa e calculamos a energia de ligação como função das dimensões L_x e L_y do fio para várias alturas das barreiras de potenciais e posições da impureza no fio, com e sem o efeito da interação elétron-fonon LO.

Comparamos nossos resultados com os obtidos por Brum[35]

para um fio retangular com barreiras infinitas e com os de Bryant[34] para um fio cilíndrico com alturas das barreiras finitas. Nossas conclusões estão contidas no capítulo 6.

CAPITULO 5: DESENVOLVIMENTO TEÓRICO E RESULTADOS

Vamos considerar um fio quântico de GaAs envolvido por $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, que tem secção de área transversal retangular e alturas das barreiras finitas para o potencial de confinamento. A impureza doadora é modelada como hidrogenóide localizada na posição $(X_I, Y_I, 0)$ e blindada pela constante dielétrica estática do GaAs. Os estados ligados do elétron e sua energia de ligação associada são obtidos resolvendo-se a equação de massa efetiva de Schrodinger. Desde que as energias de ligação (da ordem de meV) são muito menores do que a energia do gap do GaAs (1.4 eV), a aproximação de massa efetiva é apropriada para se tratar o problema.

Na aproximação de massa efetiva a hamiltoniana descrevendo a interação de um elétron com a impureza hidrogenóide e com os fonons LO do volume do GaAs num fio quântico pode ser escrita na seguinte forma:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(x, y) - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x-x_I)^2 + (y-y_I)^2 + z^2}} + \hbar\omega_{LO} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \left(v_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + v_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right) \quad (1)$$

onde $\vec{p}$ e $\vec{r} : (X, Y, Z)$ são o momento e as coordenadas do elétron, $(X_I, Y_I, 0)$ é a posição da impureza, ϵ_0 é a constante dielétrica

estática do GaAs e m é a massa efetiva do elétron que é definida como abaixo

$$m = \begin{cases} m_1 = 0.067 m_0 & \text{no GaAs} \\ m_2 = (0.067 + 0.083x) m_0 & \text{no AlGaAs,} \end{cases} \quad (2)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre e x a concentração de alumínio. $a_k^\dagger$ (a_k) são os operadores de criação (destruição) dos fonons LO de frequência ω_{LO} e vetor de onda $\vec{k}:(k_x, k_y, k_z)$. O potencial de interação elétron-fonon LO (V_k) é definido como se segue

$$V_k = -i \frac{\hbar \omega_{LO}}{|\vec{k}|} \left\{ \frac{2\pi}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{\hbar \omega_{LO}} \right\}^{1/2} \quad (3)$$

com ϵ_∞ e V a constante dielétrica a altas frequências e o volume do sistema respectivamente.

Na expressão (1) $V(X, Y)$ é o potencial de confinamento do elétron no poço de potencial retangular normal ao fio de lados L_x e L_y ,

$$V(X, Y) = \begin{cases} 0 & |X| < L_x/2 \quad |Y| < L_y/2 \\ V_{ox} & |X| > L_x/2 \quad |Y| < L_y/2 \\ V_{oy} & |Y| > L_y/2 \end{cases} \quad (4)$$

Onde V_{ox} e V_{oy} são as alturas das barreiras de potenciais;

abaixo mostramos uma figura representando $V(X,Y)$:

x e y denotam as concentrações de alumínio nas duas direções perpendiculares ao fio. As alturas das barreiras são obtidas a partir das concentrações de alumínio no $Al_xGa_{1-x}As$, como sendo de 60% do valor da descontinuidade do gap ΔE_g , que é dada como

$$\Delta E_g(\text{meV}) = 1040 \, x + 470 \, x^2$$

(5)

para a direção X e relação similar é usada para a direção Y .

De forma a calcularmos a energia de ligação do sistema elétron-fonon LO ligado à impureza hidrogenóide usamos o método variacional escolhendo várias formas para a função de onda tentativa. O modelo mais simples que pode ser imaginado para o poço retangular é considerá-lo como a sobreposição de dois poços unidimensionais (1D) desacoplados, um em cada direção de quantização. Para poços com barreiras de potenciais com alturas finitas essa aproximação será melhor quanto maior a concentração de alumínio na liga de $Al_xGa_{1-x}As$ pois no caso de barreiras de potenciais com alturas infinitas tal solução é exata. Dentro

dessa aproximação a primeira forma para a função de onda: tentativa que consideramos é a seguinte:

$$\Psi(X,Y,Z;K) = \phi(X) \phi(Y) \phi(Z) U_2|0\rangle \quad (6)$$

onde $\phi(X)$ é a bem conhecida função de onda de um elétron no estado fundamental de um poço de potencial 1D na direção X, definida como segue,

$$\phi(X) = \begin{cases} [A_x \cos(K_{1x}L_x/2) e^{\kappa_{2x}L_x/2}] e^{\kappa_{2x}X} & X < -L_x/2 \\ A_x \cos(K_{1x}X) & -L_x/2 < X < L_x/2 \\ [A_x \cos(K_{1x}L_x/2) e^{-\kappa_{2x}L_x/2}] e^{-\kappa_{2x}X} & X > L_x/2 \end{cases} \quad (7)$$

com

$$A_x = \left[\frac{1}{K_{2x}} \cos^2 \left(\frac{K_{1x}L_x}{2} \right) + \frac{1}{2K_{1x}} \sin K_{1x}L_x + \frac{L_x}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

e

$$K_{1x} = \sqrt{\frac{2m_1 E_x}{\hbar^2}} \quad K_{2x} = \sqrt{\frac{2m_2 (V_{0x} - E_x)}{\hbar^2}} \quad (9)$$

sendo que os parâmetros K_{1x} e K_{2x} são determinados da maneira usual, de modo a satisfazerem as condições de continuidade e conservação de corrente nas interfaces do poço. Desta forma temos a relação a ser satisfeita,

$$m_1 K_{2x} = m_2 K_{1x} \operatorname{tg}(K_{1x}L_x/2) \quad (10)$$

de maneira similar obtemos as expressões para $\phi(Y)$.

A impureza hidrogenóide é representada pela função de onda

variacional,

$$\phi(Z) = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} e^{-\frac{\lambda}{2} |Z|} \quad (11)$$

com λ um parâmetro variacional. Esperamos que tal função de onda seja uma boa aproximação para fios finos (L_x e L_y menores que duzentos angstroms). Para fios de grandes dimensões essa simples aproximação não recupera os valores do volume do GaAs como era esperado. Agora U_2 é uma transformação unitária que desloca as coordenadas dos fonons LO, dado por

$$U_2 = \exp\left[\sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger - f_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}})\right] \quad (12)$$

sendo $f_{\mathbf{k}}$ uma função variacional a ser obtida minimizando-se a energia do estado fundamental e o estado $|0\rangle$ é o vácuo dos fonons LO.

A energia do sistema é obtida minimizando-se o valor médio da hamiltoniana $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$, que tem a seguinte forma

$$E = E_{cin} + E_p + E_{Coul} + E_{POL} \quad (13)$$

em relação ao parâmetro λ . Na equação (13), acima, E_{cin} é a energia cinética, E_p a energia potencial, E_{Coul} a energia Coulombiana e E_{POL} a energia polarônica.

Com a forma da função de onda tentativa dada na equação (6) podemos calcular as expressões para essas energias. A energia cinética E_{cin} será

$$E_{cin} = \frac{\hbar^2}{2m_1} \left[K_{1x}^2 \frac{A_x L_x}{2} + K_{1y} A_y L_y + \frac{\lambda^2}{4} \right] \quad (14)$$

e a energia potencial terá a seguinte forma:

$$E_p = \frac{V_{0x}}{K_{2x}} A_x^2 \cos^2 \left[\frac{K_{1x} L_x}{2} \right] + V_{0y} A_y^2 \cos^2 \left[\frac{K_{1y} L_y}{2} \right] - \frac{V_{0x}}{K_{2y} K_{2x}} A_x^2 A_y^2 \cos \left[\frac{K_{1x} L_x}{2} \right] \cos \left[\frac{K_{1y} L_y}{2} \right] \quad (15)$$

Calculamos a energia coulombiana por meio da expressão,

$$E_{coul} = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \int dx \int dy \int dz \frac{|\phi(x)|^2 |\phi(y)|^2 |\phi(z)|^2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} \quad (16)$$

Através da transformação

$$\frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dq_z K_0(q_z \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}) e^{-q_z z} \quad (17)$$

onde $K_0(X)$ é a função modificada de Bessel de segunda espécie de ordem zero, a expressão para E_{coul} fica mais fácil de ser trabalhada. Realizando a integração em Z , temos

$$E_{coul} = -\frac{2e^2 \lambda^2}{\pi \epsilon_0} \int_0^\infty dq_z \frac{F(q_z)}{(\lambda^2 + q_z^2)} \quad (18)$$

sendo $F(q_z)$ o fator de forma para a impureza,

$$F(q_z) = \int dx \int dy |\phi(x)|^2 |\phi(y)|^2 K_0 [q_z \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}] \quad (19)$$

Devido à simplicidade das funções de onda que descrevem o movimento do elétron no plano normal ao fio, podemos calcular $F(q_z)$ analiticamente e colocá-lo em uma forma mais conveniente. Assim fazemos

$$F(q_z) = \int_0^{\infty} dq_1 \frac{G(q_1) H(q_1, q_z)}{\sqrt{q_1^2 + q_z^2}} \quad (20)$$

onde

$$H(q_1, q_z) = \int dx |\phi(x)|^2 e^{-\sqrt{q_1^2 + q_z^2} \cdot |x - x_i|} \quad (21)$$

$$G(q_1) = \int dy |\phi(y)|^2 \cos[(y - y_i) q_1] \quad (22)$$

Calculando as expressões (21) e (22), explicitamente temos

$$\begin{aligned} H(q_1, q_z) = & \frac{2 A_x^2}{Q + 2 K_{2x}} e^{\frac{-Q L_x}{2}} \cos^2(K_{1x} L_x / 2) \cosh Q x_i \\ & + \frac{A_x^2}{Q^2 + 4 K_{1x}^2} \left\{ \frac{4 K_{1x}^2}{Q} + 2 e^{\frac{-Q L_x}{2}} \cosh Q x_i \left[K_{1x} \operatorname{Sen}(K_{1x} L_x) \right. \right. \\ & \left. \left. - Q^2 \cos^2 \left[\frac{K_{1x} L_x}{2} \right] - \frac{2 K_{1x}^2}{Q} \right] + 2 Q \cos^2(K_{1x} x_i) \right\} \quad (23) \end{aligned}$$

com $Q = (q_1^2 + q_z^2)^{\frac{1}{2}}$

$$G(q_1) = \frac{2 A_y^2}{q_1^2 + 4 K_{2y}} \cos^2 \left[\frac{K_{1y} L_y}{2} \right] \cos(q_1 y_i) \left[2 K_{2y} \cos \left(\frac{q_1 L_y}{2} \right) - q_1 \operatorname{Sen} \frac{q_1 L_y}{2} \right] \quad (24)$$

Vamos considerar agora a contribuição polarônica, fruto da interação entre o elétron e os fonons LO do volume do GaAs, para a energia de ligação. Desde que o acoplamento elétron-fonon LO é fraco para o GaAs, o cálculo da energia polarônica pode ser realizado usando-se o método variacional de Lee-Low-Pines [38]. Partindo da definição temos

$$E_{POL} = \langle \Psi | \hbar \omega_{LO} \sum_K a_K^\dagger a_K + \sum_K (V_K a_K e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + V_K^* a_K^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}) | \Psi \rangle \quad (25)$$

escrevendo

$$\Psi(\mathbf{r}; \mathbf{k}) = \Psi(\mathbf{r}) U_2 | 0 \rangle \quad (26)$$

definimos

$$\tilde{V}_K = \langle \Psi(\mathbf{r}) | V_K e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \quad (27)$$

assim podemos colocar a expressão da energia polarônica na forma

$$E_{POL} = \langle 0 | U_2^{-1} \hbar \omega_{LO} \sum_K a_K^\dagger a_K + \sum_K (\tilde{V}_K a_K + \tilde{V}_K^* a_K^\dagger) U_2 | 0 \rangle \quad (28)$$

Substituindo-se nessa expressão U_2 dado pela equação (12), depois de alguns cálculos teremos

$$E_{POL} = \hbar \omega_{LO} \sum_K |f_K|^2 + \sum_K (\tilde{V}_K f_K + \tilde{V}_K^{**} f_K^*) \quad (29)$$

Impondo a condição de minimização

$$\frac{\partial E_{pol}}{\partial \zeta_K} = \frac{\partial E_{pol}}{\partial \zeta_K^*} = 0 \quad (30)$$

obtemos que

$$\tilde{V}_K = -f_K^* (\hbar \omega_{LO}) \quad (31)$$

Substituindo essa expressão para $\tilde{V}_K$ na equação (29) e trocando a somatória por integrais, obtemos

$$E_{POL} = -\frac{V}{(2\pi)^3} \int dK_z \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty K dK \frac{|\tilde{V}_K|^2}{\hbar \omega_{LO}} \quad (32)$$

Calculando o elemento de matriz da equação (27), chegamos à seguinte expressão

$$|\tilde{V}_K|^2 = |V_K|^2 F_{01D}(K_z) \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + K_z^2} \quad (33)$$

onde $F_{01D}(K_z)$ é o fator de forma quase-unidimensional (Q1D) definido como segue:

$$F_{01D}(K_z) = \int dx \int dx' \int dy \int dy' |\phi(x)|^2 |\phi(y)|^2 |\phi(x')|^2 |\phi(y')|^2 K_0 [K_z \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}] \quad (34)$$

que pode como antes ser posto na forma

$$F_{01D}(K_z) = \int_0^\infty dq_\perp \frac{G(q_\perp) H(K_z, q_\perp)}{\sqrt{q_\perp^2 + K_z^2}} \quad (35)$$

onde

$$H(K_z, q_1) = \int dx \int dx' |\phi(x)|^2 |\phi(x')|^2 e^{-\sqrt{q_1^2 + K_z^2} |x-x'|} \quad (36)$$

é o fator de forma quase bidimensional para um poço quântico com barreiras finitas definido no capítulo 2 (equação 52). Temos ainda

$$G(q_1) = \int dy \int dy' |\phi(y)|^2 |\phi(y')|^2 e^{i q_1 (y-y')} \quad (37)$$

realizando as integrações temos

$$G(q_1) = (\Gamma_1 + \Gamma_2)^2 \quad (38)$$

onde

$$\Gamma_1 = \frac{2 A_y^2 \cos^2(K_{1y} L_y / 2)}{4 K_{2y}^2 + q_1^2} \left[2 K_{2y} \cos \frac{q_1 L_y}{2} - q_1 \sin \frac{q_1 L_y}{2} \right] \quad (39)$$

$$\Gamma_2 = A_y^2 \left[\frac{1}{q_1} \sin \frac{q_1 L_y}{2} + \frac{\sin(2 K_{1y} + q_1) L_y / 2}{2(2 K_{1y} + q_1)} + \frac{\sin(2 K_{1y} - q_1) L_y / 2}{2(2 K_{1y} - q_1)} \right] \quad (40)$$

Substituindo o elemento de matriz da equação (33) na equação (32), chegamos à expressão de $E_{p,0,1}$ conveniente para nossos cálculos numéricos que é

$$E_{POL} = - \frac{e^2 \lambda^4}{\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dk_z \frac{F(k_z)}{(\lambda^2 + k_z^2)^2} \quad (41)$$

Tendo obtido as expressões para as energias cinética, potencial, coulombiana e polarônica, podemos calcular a energia de ligação do sistema, que é definida como sendo a diferença entre o valor da energia do elétron no estado fundamental do fio quântico não perturbado e o valor minimizado de E dado pela equação (13).

Na sequência apresentamos os resultados numéricos que obtivemos para a energia de ligação do sistema em função das dimensões L_x e L_y do fio para vários valores das alturas das barreiras de potenciais e diferentes posições da impureza no fio com e sem a presença da interação elétron-fonon LO.

Na figura 5.1 mostramos nossos resultados para a energia de ligação da impureza em função da largura L_x do fio para L_y fixo em 50, 100, 150 e 200 angstroms. A impureza está localizada no centro do fio que tem as alturas das barreiras de potenciais infinitas. Nestes resultados estamos desprezando a interação elétron-fonon LO. Como podemos notar a energia de ligação cresce abruptamente conforme as dimensões do fio são reduzidas e seus valores são mais altos que em duas e três dimensões. Na figura 5.2 mantemos L_y fixo em 100 angstroms e consideramos três posições da impureza, no centro (C), no centro de um dos lados (B) e no canto superior (A) do fio. A energia de ligação é maior quando a impureza está no centro do fio, do que nas outras posições. A razão disso é que as funções de onda se anulam nas paredes e portanto sua contribuição para a energia é maior quando a impureza está no centro do fio.

Figura 5.1: Energia de ligação de uma impureza hidrogenóide colocada no centro de um fio quântico de GaAs envolvido por AlGaAs, com alturas das barreiras de potenciais infinitas. Não estamos considerando a interação elétron-fonon LO. A energia de ligação cresce abruptamente com a redução das dimensões do fio.

Figura 5.2: Energia de ligação em função de L_x para $L_y = 100 \text{ Å}$, para três posições da impureza no fio, no centro (C), no centro de um dos lados (B) e no canto superior (A) de um fio quântico Q1D com alturas das barreiras de potenciais infinitas.

Brum [35] também calculou a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide em um fio quântico retangular com barreiras infinitas. Em seus cálculos ele usou uma função de onda tentativa da mesma forma que a dada na equação (6), só que para a função de onda variacional hidrogenóide ele usou a função tridimensional dada abaixo

$$\phi(x,y,z) = N \exp \left[-\lambda \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2} / 2 \right] \quad (42)$$

em vez da simples forma da equação (11). A vantagem dessa última é que os cálculos são facilitados e a desvantagem é que no limite de fios muito grandes ($L_x, L_y \rightarrow \infty$) nós não recuperamos os resultados tridimensionais, como a expressão acima da equação (42) o faz. No entanto os nossos resultados e os obtidos por Brum na região de fios finos são muito próximos. Por exemplo, para um fio com $L_x=L_y=100$ angstroms e impureza no centro ele encontrou o valor 24.4 meV para a energia de ligação e nós o valor 24.6 meV.

A figura 5.3 mostra os resultados para a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide localizada no centro de um fio quântico com alturas das barreiras de potenciais finitas. As concentrações de alumínio nas barreiras são $x=y=0.3$ e $x=y=0.15$. Como podemos notar para um mesma concentração de alumínio e um valor determinado de L_y , a energia de ligação apresenta a mesma propriedade qualitativa obtida previamente para poços quânticos bidimensionais [39]. O valor da energia de ligação cresce até um ponto onde atinge um valor máximo e então decresce tendendo ao valor da energia de ligação de uma impureza no volume do AlGaAs. A energia de ligação cresce com o aumento das alturas das barreiras de potenciais devido ao aumento do confinamento.

Figura 5.3: Energia de ligação para o estado fundamental de uma impureza hidrogenóide no centro de um fio quântico retangular com alturas das barreiras de potenciais finitas sem a presença da interação elétron-fonon LO, para duas concentrações de alumínio $x=y=0.3$ (linhas cheias) e $x=y=0.15$ (linhas tracejadas).

Na figura 5.4 mostramos a energia de ligação de uma impureza situada no meio de um fio quântico com $L_y=50 \text{ \AA}$, para diferentes valores das concentrações de alumínio nas duas direções de quantização. Trocando as alturas das barreiras de confinamento nas direções X e Y obtemos valores distintos das energias de ligação, no caso onde as concentrações de alumínio são (0.3,0.15) e (0.15,0.30) nas direções (X,Y), podemos ver da figura que para $L_x > L_y=50 \text{ \AA}$ a energia de ligação está relacionada ao confinamento na direção Y, onde a barreira de potencial é mais alta. De outra maneira para $L_x < L_y=50 \text{ \AA}$ o confinamento é mais pronunciado na direção X, que tem a concentração maior de alumínio. Podemos ver da figura que o modelo infinito para as barreiras de potenciais superestima os valores das energias de ligação.

Os resultados para a energia de ligação conforme a impureza se desloca ao longo da diagonal de um fio quântico com $L_x=L_y=200$ angstroms estão na figura 5.5, para vários valores das alturas das barreiras de potenciais. Desses resultados podemos notar que os estados ligados em um fio quântico com barreiras finitas têm energias de ligação mais baixas do que em um fio com barreiras infinitas quando a distância da impureza ao centro do fio é menor que $60 \text{ \AA}$. Conforme a posição da impureza ultrapassa essa marca e se aproxima dos contornos a situação se inverte e a energia de ligação para fios com barreiras finitas é mais alta. Essa mudança ocorre porque as contribuições nos contornos são mais significativas quando as barreiras de potenciais têm as alturas finitas.

Figura 5.4 : Energia de ligação de uma impureza hidrogenóide localizada no centro de um fio quântico retangular, com $L_y = 50 \text{ Å}$ para várias concentrações diferentes de alumínio nas direções (X,Y).

Figura 5.5 : Energia de ligação em função das posições da impureza no fio, conforme esta se move ao longo da diagonal de um fio $200 \text{ \AA} \times 200 \text{ \AA}$, para várias alturas diferentes das barreiras de potenciais.

O crescimento da energia de ligação em função da concentração x de alumínio fixada a concentração y em dois valores $y=0.3$ e $y=0.15$ é mostrada na figura 5.6, para duas posições da impureza, no centro e no centro de um dos lados de um fio com $L_x=L_y=100$ Å. Podemos observar que a energia de ligação cresce com o aumento das alturas das barreiras de potenciais e é mais alta para a impureza no centro.

Figura 5.6: Energia de ligação em função da concentração x , fixada a concentração y em dois valores $y=0.3$ (linhas tracejadas) e $y=0.15$ (linhas cheias), para duas posições da impureza, no centro (1) e no centro de um dos lados (2), de um fio com $L_x=L_y=100$ Å.

Uma comparação entre os resultados para a energia de ligação de uma impureza localizada no centro de um fio quântico com concentrações de alumínio $x=y=0,3$ com e sem a contribuição polarônica é mostrada na figura 5.7. Os valores de L_y são fixados em 50 e 100 angstroms. A diferença entre as energias de ligação (ΔE) considerando a interação elétron-fonon LO e sem considerá-la para um mesmo valor de L_y , cresce com o crescimento de L_x até atingir um valor máximo no pico da curva ($L_x=30 \text{ \AA}$) e então decresce para valores maiores de L_x . Para L_x fixo ΔE cresce com a diminuição de L_y , por exemplo $L_y=100 \text{ \AA}$ $\Delta E=1,77 \text{ meV}$ e $L_y=50 \text{ \AA}$ $\Delta E=2,09 \text{ meV}$. Na tabela 5.1 podemos observar o valor quantitativo da variação da energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO. Note-se que para L_y fixo a contribuição percentual do efeito polarônico para a energia de ligação é praticamente constante.

L_x ($\text{\AA}$)	E ligação com fonon	E ligação sem fonon	acrécimo %	ΔE (meV)
15	27,33	25,38	7,70%	1,952
30	28,96	26,88	7,76%	2,085
60	26,90	24,97	7,76%	1,937
120	22,47	20,85	7,73%	1,613
200	18,52	17,20	7,77%	1,325

Tabela 5.1: Para um fio quântico com $L_y=50 \text{ \AA}$ e $x=y=0,30$ e impureza no centro, mostramos para alguns valores de L_x a energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO, bem como o acréscimo percentual e a diferença ΔE entre as energias.

Figura 5.7 : Energia de ligação do estado fundamental de impureza situada no centro de um fio quântico, com e sem a presença da interação elétron-fonon LO.

Deslocando a impureza do centro do fio a contribuição polarônica em termos percentuais cresce. Na figura 5.8 para um fio com $L_y=50 \text{ Å}$ e $x=y=0,30$ mostramos a variação da energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO para duas posições da impureza, no centro e no centro de um dos lados do fio. A

variação da energia ΔE é menor quando a impureza está longe do centro, mas a variação percentual é maior.

Figura 5.8: Energia de ligação para um fio com concentrações $(0,3, 0,3)$ e $L_y = 50$ Å. Tomamos duas posições para a impureza no fio no centro e no centro de um dos lados, com e sem a presença dos fonons LD.

Esse resultado pode ser melhor observado na figura 5.9, onde deslocamos a impureza ao longo da diagonal de um fio com $L_x=L_y=200$ Å para duas alturas das barreiras de potenciais.

Figura 5.9: Energia de ligação para uma impureza se deslocando na diagonal de um fio 200 Å X 200 Å, com (linhas tracejadas) e sem (linhas cheias) a contribuição polarônica.

Na tabela 5.2 apresentamos alguns números pertencentes à figura 5.9. A variação da diferença entre as energias de ligação, ΔE vale 0,946 meV quando a impureza está na posição $X_I=Y_I= 5 \text{ \AA}$ e $\Delta E=0.722 \text{ meV}$ para $X_I=Y_I= 100 \text{ \AA}$. Embora ΔE diminua com o distanciamento da impureza ao centro, em termos de porcentagens a contribuição polarônica aumenta a energia de ligação de 7,63% para 13,65% respectivamente.

X_I ($\text{\AA}$)	Eligação com fonon	Eligação sem fonon	acrécimo %	ΔE (meV)
5	13,34	12,39	7,63%	0,946
10	13,21	12,26	7,70%	0,944
20	12,94	11,75	7,90%	0,933
40	10,94	10,04	8,89%	0,893
80	7,22	6,44	12,0%	0.773
100	6,01	5,29	13,6%	0,722

Tabela 5.2 : Para um fio quântico com $L_x=L_y=200 \text{ \AA}$ e $x=y=0.3$, mostramos para alguns valores de X_I a energia de ligação (meV) com e sem a presença dos fonons LO, bem como o acréscimo percentual devido ao efeito polarônico e a diferença E entre elas.

Para completar nossa discussão na figura 5.10 plotamos a energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO em função das concentrações $x=y$ para dois fios diferentes, um com tamanho $L_x = 50 \text{ \AA}$ e $L_y = 150 \text{ \AA}$ e a impureza localizada no centro e outro

com dimensões $L_x = 100 \text{ \AA}$ e $L_y = 200 \text{ \AA}$ e a impureza no centro do lado superior. Para o primeiro caso com a impureza no centro o crescimento da energia de ligação com o crescimento das alturas das barreiras de potenciais é bem acentuado. A contribuição polarônica cresce com o aumento das concentrações, por exemplo para $x=y=0.03$ temos $\Delta E=0,625$ o que corresponde a um crescimento da energia de ligação da ordem de 7%, enquanto que para $x=y=0,4$ temos $\Delta E=1,55 \text{ meV}$ um acréscimo da ordem de 7,8%.

No segundo caso onde o fio é maior e a impureza está fora do centro, o crescimento da energia de ligação em função das concentrações é mais discreto, sendo que para valores acima de $x=y=0.08$ a energia de ligação é quase insensível às alterações nas alturas das barreiras de potenciais. O aumento imposto pelo efeito polarônico varia de 10% em 0,03 a 13,8% em 0,4, portanto maior que o caso anterior onde a impureza está no centro do fio, mas em termos de crescimento da energia, ΔE neste caso é menor sendo de 0,629 e 0,912 para $x=0,03$ e $x=0,4$.

Na referência [36], Bryant calculou a energia de ligação de um impureza hidrogenóide no centro de um fio quântico retangular com alturas infinitas das barreiras de potenciais e comparou seus resultados com os obtidos previamente [34] para fios cilíndricos também com barreiras infinitas. Ele encontrou que para fios quadrados e cilíndricos com áreas das secções transversais iguais a energia de ligação mudava muito pouco, menos de 5%. Tal propriedade também deve ser válida para fios com alturas das barreiras finitas.

Figura 5.10 : Energia de ligação em função das concentrações ($x=y$) com e sem a presença dos fonons LO, para dois fios de diferentes tamanhos e posições da impureza.

Um bom teste para averiguarmos a validade deste nosso primeiro modelo será comparar nossos resultados para fios quadrados com os resultados de Bryant para fios cilíndricos com barreiras finitas com a mesma área da secção transversal. Essa comparação é feita na tabela 5.3 abaixo,

raio do cilindro (A)	Lado do quadrado (A)	Eligação cilindro (meV)	Eligação quadrado (meV)	% em relação ao fio quadr.	diferença energias (meV)
26,27	47	27,31	26,18	4,3%	1,129
39,41	70	24,78	22,86	8,4%	1,92
52,55	93	21,71	20,07	8,1%	1,63
65,7	116,5	19,16	17,88	7,2%	1,28
78,83	140	17,6	16,16	8,9%	1,44
147,1	280	11,87	10,43	13,9%	1,44

Tabela 5.3: Comparação entre os resultados de Bryant para o fio cilíndrico e os nossos obtidos com o uso da função tentativa dada na equação (6), para fios com barreiras finitas, impureza no centro e $x=y=0,3$.

Como vemos a energia de ligação para fios quadrados de área $L^2 = \pi r^2$, onde r é o raio do fio cilíndrico está abaixo dos valores calculados para fios cilíndricos com a mesma área. Para fios com $L > 200 \text{ \AA}$ a diferença é maior, mas neste intervalo nosso modelo já era sabido não ser bom. Intuitivamente era esperado que a energia de ligação de fios cilíndricos fosse maior que em fios quadrados com a mesma área da secção transversal, porque a forma circular sem quinas permite uma melhor acomodação da função de onda do elétron aos contornos oferecendo assim um melhor confinamento. No entanto as diferenças na sua maioria são da ordem do erro experimental 8%, maiores que o desejado, isso se deve certamente à forma simplista de nossa função de onda tentativa, que descreve o movimento eletrônico no plano normal ao fio como sendo dado pelo produto das funções de ondas analíticas de um elétron em dois poços unidimensionais desacoplados um em cada direção de quantização.

Com o intuito de melhorarmos nossos resultados, escolhemos para a função de onda tentativa uma segunda forma, dada pela expressão,

$$\Psi_{12}(X,Y,Z;K) = \sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 X^2 + \beta^2 Y^2)} \phi(X,Y,Z) U_2 |0\rangle \quad (43)$$

onde α e β são parâmetros variacionais e U_2 e $|0\rangle$ foram definidos anteriormente. Aqui nós testaremos três formas diferentes para a função de onda variacional relacionada à impureza hidrogenóide, $\phi(X,Y,Z)$. Além daquela usada anteriormente definida pela equação (11), testaremos a utilizada por Brum [35] definida na equação

(42) e outra do tipo gaussiana definida abaixo

$$\phi(z) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\frac{\lambda}{2} z^2} \quad (44)$$

A energia total do sistema é obtida minimizando-se o valor esperado da hamiltoniana

$$E^{(2)} = \langle \psi_2 | H | \psi_2 \rangle \quad (45)$$

que como antes pode ser posta na forma

$$E^{(2)} = E_{CIN}^{(2)} + E_P^{(2)} + E_{COUL}^{(2)} + E_{POI}^{(2)} \quad (46)$$

onde o índice (2) refere-se à segunda solução do problema. A energia de ligação do sistema é obtida fazendo-se a diferença entre o valor minimizado da energia do elétron no poço retangular não perturbado e o valor minimizado de E dado na equação (46).

Antes de darmos as formas para as energias cinética, potencial, coulombiana e polarônica usadas em nossos cálculos numéricos para este segundo caso, vamos escolher entre as três formas descritas para a função de onda da impureza, aquela mais apropriada. Na figura 5.11 mostramos uma comparação entre as energias de ligação calculadas com as funções da impureza dadas pela equações (11) e (44). A impureza está localizada no centro do fio e as concentrações de alumínio são $x=y=0.3$. É claramente visível desta figura que a função gaussiana dá melhores resultados para todos os valores de L_x e L_y considerados.

Figura 5.11: Comparação entre os resultados para a energia de ligação, para as duas funções de onda da impureza, gaussiana e hidrogenóide unidimensional.

Figura 5.12: Comparação entre os resultados para a energia de ligação, para as duas funções de onda da impureza, gaussiana (linhas cheias) e hidrogenóide tridimensional (linhas tracejadas).

Figura 5.11: Comparação entre os resultados para a energia de ligação, para as duas funções de onda da impureza, gaussiana e hidrogenóide unidimensional.

No entanto uma comparação entre a hidrogenóide tridimensional da equação (42) e a gaussiana equação (44) não mostra diferenças tão marcantes, como pode ser observado na figura 5.12. Como era esperado na região onde $L_x > 200 \text{ \AA}$ a função tridimensional é mais recomendada, mas na região de fios finos as diferenças entre as duas são pequenas e elas se revezam em nos dar energias de ligação maiores.

A desvantagem do uso da função tridimensional é que o cálculo da energia polarônica fica extremamente complicado. Essa é a razão que nos leva a optar pela forma gaussiana, que torna os cálculos muito mais simples. Assim nossa função de onda tentativa fica da forma

$$\Psi_2(X,Y,Z;K) = \left[\frac{\alpha \beta \sqrt{\lambda}}{\pi^{3/2}} \right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 x^2 + \beta^2 y^2 + \lambda z^2)} \quad U_2 \text{ 10} \quad (47)$$

onde α , β e λ são os parâmetros a serem minimizados. A princípio, como o potencial que descreve o poço retangular equação (4) não é separável, tentamos incluir em nossa função de onda gaussiana um termo que misturasse o movimento eletrônico nas direções X e Y. Com a inclusão de tal termo nossa função de onda tentativa ficou da forma

$$\Psi(X,Y,Z;K) = N_1 e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 x^2 + \beta^2 y^2 + \gamma^2 |xy| + \lambda z^2)} \quad U_2 \text{ 10} \quad (48)$$

onde N_1 diz respeito à normalização e γ é um parâmetro variacional. No entanto depois de muitos cálculos computacionais com essa função de onda tentativa para o estado fundamental do

fio quântico, obtivemos que o fator de mistura era desprezível ($\sim 10^{-7} \text{ \AA}^{-2}$), dando uma contribuição muito pequena para a energia de ligação do sistema. Por esse motivo é que em nossos cálculos consideramos a função tentativa separável em X e Y definida na equação (47). Vamos então com a função de onda gaussiana calcularmos as expressões das energias dadas na equação (46). A energia cinética é dada por

$$\begin{aligned}
 E_{\text{CIN}}^{(2)} = & \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m_1} \left(\frac{m_{1x}}{m_{2x}} \right) \left\{ 1 - \frac{(m_2 - m_1)}{m_{1x}} \left[\frac{\alpha L_x e^{-\frac{\alpha^2 L_x^2}{4}}}{\sqrt{\pi}} - \Psi(\alpha L_x/2) \right] \right\} \\
 & + \frac{\hbar^2 \beta^2}{4m_1} \left(\frac{m_{1y}}{m_{2y}} \right) \left\{ 1 - \frac{(m_2 - m_1)}{m_{1y}} \left[\frac{\beta L_y e^{-\frac{\beta^2 L_y^2}{4}}}{\sqrt{\pi}} - \Psi(\beta L_y/2) \right] \right\} \\
 & + \frac{\hbar^2 \lambda}{4m_1}
 \end{aligned}
 \tag{49}$$

$m_{1x} = m_{1,y}$

onde $\Psi(X)$ é a função erro definida como

$$\Psi(X) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^X e^{-t^2} dt
 \tag{50}$$

Para a energia potencial, E_p , temos a seguinte expressão:

$$E_p^{(2)} = V_{0x} [1 - \Psi(\alpha L_x/2)] \Psi(\beta L_y/2) + V_{0y} [1 - \Psi(\beta L_y/2)]
 \tag{51}$$

A energia coulombiana

$$E_{\text{Coul}}^{(2)} = - \frac{e^2}{\epsilon_0} \langle \Psi_2 | \frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} | \Psi_2 \rangle
 \tag{52}$$

pode ser calculada facilmente notando que

$$\frac{1}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + z^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} e^{-t(x-x_i)^2} e^{-t(y-y_i)^2} e^{-tz^2}; \quad (53)$$

realizando as integrações em X, Y e Z obtemos a expressão final para a energia coulombiana que é,

$$E_{\text{Coul}}^{(2)} = - \frac{e^2 \alpha \beta \sqrt{\lambda}}{\epsilon_0 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} \frac{e^{-t(x_i^2 + y_i^2)} e^{-t^2 \left[\frac{x_i^2}{\alpha^2 + t} + \frac{y_i^2}{\beta^2 + t} \right]}}{\sqrt{t} (\alpha^2 + t) (\beta^2 + t) (\lambda + t)}; \quad (54)$$

Resta-nos o cálculo da energia polarônica, neste caso temos que o elemento de matriz

$$\tilde{V}_k = \langle \Psi_2 | V_k e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} | \Psi_2 \rangle \quad (55)$$

é dado por

$$\tilde{V}_k = V_k e^{\frac{-K_x^2}{4\alpha^2}} e^{\frac{-K_y^2}{4\beta^2}} e^{\frac{-K_z^2}{4\lambda}}; \quad (56)$$

substituindo essa expressão na equação (29) obtemos a expressão procurada

$$E_{\text{pol}}^{(2)} = - \frac{e^2 \alpha \beta \sqrt{\lambda}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{(1+2\lambda t)(1+2\beta^2 t)(1+2\alpha^2 t)}} \quad (57)$$

Dessa forma a expressão de E_2 utilizada em nossas avaliações numéricas da energia de ligação é conhecida e será minimizada em relação aos parâmetros α , β e λ .

Figura 5.13: Comparação entre os nossos dois modelos, para um fio com a impureza no centro e $x=y=0,3$, o primeiro modelo só dá bons resultados se $L_x < 40 \text{ Å}$ para $L_y = 50 \text{ Å}$.

Esperamos que essa segunda solução do problema nos dê resultados melhores que a primeira, por estarmos tratando variacionalmente a função de onda do estado fundamental do poço não perturbado. Na figura 5.13 para um fio quântico com a impureza localizada no centro e concentrações de alumínio x e y nas barreiras iguais a 0,3, mostramos nossos resultados para a energia de ligação do sistema sem a presença dos fonons LO para os dois modelos discutidos anteriormente. Comparando os dois resultados vemos que com a função de onda gaussiana (linhas tracejadas) obtemos melhores resultados. Com o primeiro modelo referente à equação (6) para a função tentativa (linhas cheias) só obtemos bons resultados na região de fios muito finos ($L_x < 40$ Å e $L_y = 50$ Å). A diferença entre os dois resultados cresce com o tamanho L_x para um valor determinado de L_y , chegando a ser da ordem de 2 meV em $L_y = 200$ Å. Percentualmente a diferença cresce com o tamanho do fio sendo de 11,7% quando $L_x = 200$ Å e $L_y = 50$ Å até 16% para $L_x = L_y = 200$ Å. Outra comparação entre os dois modelos é apresentada na figura 14 quando a impureza se desloca na diagonal de um fio 100×100 Å² para várias concentrações de alumínio. Como vemos os resultados obtidos com a função de onda tentativa gaussiana são melhores, para todas as posições da impureza ao longo da diagonal.

Mostramos nossos resultados para as energias de ligação obtidas com a função de onda gaussiana com e sem a contribuição polarônica para duas concentrações de alumínio (0,15, 0,15) e (0,3, 0,3) nas direções (X,Y) quando a impureza está no centro do fio nas figuras 5.15 e 5.16.

Figura 5.14: Comparação entre os dois modelos, para uma impureza se deslocando na diagonal de um fio 100X100 Å², para várias concentrações de alumínio.

A diferença entre as energias de ligação com e sem a presença dos fonons LO, ΔE para um valor fixo de L_y cresce até atingir um valor máximo e então diminui com o crescimento de L_x .

Figura 5.15: Energia de ligação como função de L_x , para L_y fixo em três valores, para um fio com a impureza no centro e $x=y=0,3$. Com e sem a contribuição polarônica, segundo modelo.

Em termos de quantidades essa propriedade pode ser observada na tabela 5.4, para um fio com concentrações $x=y=0,3$.

L_x (Å)	Eligação com fonon	Eligação sem fonon	acrescimo %	ΔE (meV)
20	24,54	22,60	8,70%	1,940
30	25,71	23,68	8,60%	2,030
100	22,68	20,92	8,43%	1,760
200	19,02	17,55	8,39%	1,470
300	16,71	15,42	8,37%	1,290

Tabela 5.4: Para um fio quântico com $L_y=100$ Å e $x=y=0,30$ e impureza no centro, mostramos para alguns valores de L_x a energia de ligação com e sem a presença dos fonons LO, bem como o acréscimo percentual e a diferença ΔE entre as energias.

Percentualmente a contribuição polarônica é praticamente constante ao longo da curva com L_y fixo e um dado par de concentrações. Para $x=y=0,3$ podemos ver da tabela 4, que a contribuição polarônica varia de 8,7% em $L_x=20$ Å até 8,37% em $L_x=300$ Å, uma variação da ordem de 0,3%. Para $x=y=0,15$ a variação percentual é um pouco maior variando de 9,28% até 8,42%, uma variação da ordem de 0,86% portanto maior que a observada para as concentrações $x=y=0,3$. No entanto ΔE é menor neste caso variando de $\Delta E=1,35$ meV até $\Delta E=1,19$ meV para os mesmos valores da tabela 5.4. Comparando os resultados de nossa primeira solução com o presente, podemos observar que o primeiro modelo subestima a contribuição elétron-fonon LO para a energia de ligação em cerca de 1%.

Figura 5.16: Energia de ligação como função de L_x , para L_y fixo em três valores, para um fio com a impureza no centro e $x=y=0,15$. Com e sem a contribuição polarônica, segundo modelo.

O comportamento da energia de ligação com e sem a contribuição polarônica conforme a impureza se desloca ao longo da diagonal de um fio $100 \text{ \AA} \times 100 \text{ \AA}$, com $x=y=0,3$ é mostrado na figura 5.17 e é similar qualitativamente ao descrito para a figura 5.9. A variação de ΔE é de $1,7 \text{ meV}$ quando a impureza está no centro, o que representa um acréscimo de $8,1\%$ devido ao efeito polarônico sobre a energia de ligação e quando a impureza está na posição $(50, 50)$ temos $\Delta E=1,3 \text{ meV}$ um aumento de $13,1\%$.

Finalmente na figura 5.18 mostramos a variação da energia de ligação com e sem os fonons LO em função da concentração $x=y$, para um fio com a impureza no centro e dimensões $100 \times 100 \text{ \AA}^2$. O comportamento qualitativo é o mesmo da figura 5.10, com ΔE sendo maior quanto maior as concentrações $x=y$. No entanto entre os dois resultados há uma diferença entre as estimativas percentuais, anteriormente a contribuição crescia de 7% para $7,8\%$ com o crescimento das concentrações de $x=y=0,03$ para $x=y=0,4$. Agora o crescimento na figura 5.18 é de $8,25\%$ para $x=y=0,4$ e de $9,2\%$ para $x=y=0,05$, portanto ocorreu uma inversão na direção do crescimento percentual.

Para concluir nossa análise, falta ainda compararmos nossos resultados para fios quadrados com concentração $x=y=0,3$, impureza no centro e sem a contribuição polarônica para a energia de ligação com os resultados para fios cilíndricos do Bryant [34] com a mesma área da secção transversal. Tal comparação é feita na tabela 5.5.

Figura 5.17 : Energia de ligação em função da posição da impureza, conforme esta se desloca sobre a diagonal de um fio com $L_x=L_y=100 \text{ \AA}$, para duas concentrações $(0,3, \ 0,3)$ e $(0,15, \ 0,15)$. Com e sem a presença da interação elétron-fonon LO.

raio do cilindro (Å)	Lado do quadrado (Å)	Eligação cilindro (meV)	Eligação quadrado (meV)	% em relação ao fio quadr.	diferença energias (meV)
26,27	47	27,31	26,32	3,7%	0,99
39,41	70	24,78	23,93	3,5%	0,85
52,55	93	21,71	21,61	0,5%	0,1
65,7	116,5	19,16	19,67	- 2,7%	-0,51
78,83	140	17,6	18,09	- 2,8%	-0,49
147,1	280	11,87	12,63	- 6,4%	-0,76

Tabela 5.5: Comparação entre os resultados de Bryant para o fio cilíndrico com os nossos resultados para fios retangulares, obtidos com o uso da função tentativa gaussiana.

Como podemos ver as diferenças entre a energias de ligação são inferiores a 3,7% para fios quadrados com $L < 140$ Å, sendo que $L^2 = \pi r^2$, onde r é o raio do fio cilíndrico. Para $L=280$ Å a diferença é da ordem de 6,4%, mas nessa região onde $L > 200$ Å, não

esperamos que nosso modelo gaussiano para a função tentativa de resultados melhores. Embora a diferença entre as energias de ligação mude de sinal ao passar por $L=116,5 \text{ \AA}$, elas são pequenas e reforçam os argumentos de Bryant [34] obtidos para o modelo de barreiras infinitas, que o parâmetro que relaciona as energias de ligação para fios com diferentes geometrias é a área de secção transversal do fio. As diferenças entre os resultados ficam por conta da geometria que por si só modela e limita o universo de soluções que podem ser utilizadas. Então para fios finos L_x e L_y menores que $200 \text{ \AA}$, a função de onda tentativa gaussiana é uma boa aproximação para a solução do problema.

Neste capítulo nós obtivemos a energia de ligação de um elétron a uma impureza hidrogenóide em um fio quântico retangular de GaAs envolvido por $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ através do método variacional escolhendo várias formas diferentes para as funções de onda tentativas. Obtivemos a energia de ligação como função das dimensões L_x e L_y do fio para várias alturas das barreiras de potenciais e posições da impureza no fio. Também avaliamos a contribuição do efeito da interação eletrôn-fonon LO para a energia de ligação e comparamos nossos resultados com aqueles para fios cilíndricos com barreiras finitas com a mesma área da secção transversal. O próximo capítulo é reservado para nossas conclusões.

Figura 5.18: Energia de ligação como função das concentrações ($x=y$) para um fio com $L_x=L_y = 100 \text{ \AA}$ com a impureza no centro. Com e sem a contribuição polarônica, segundo modelo.

CAPITULO 6: CONCLUSÕES

Na primeira parte deste trabalho estudamos os efeitos polarônicos sobre um gás de elétrons Q2D presente em heterojunções e poços quânticos de GaAs-AlGaAs, sob a ação de um campo magnético uniforme aplicado na direção normal à interface (direção Z). Calculamos o deslocamento da energia do elétron através da teoria de perturbação de segunda ordem levando em consideração os efeitos da não parabolicidade das bandas de condução do GaAs, via um modelo de três bandas, e os efeitos da blindagem da interação eletron-fonon LO através de uma constante dielétrica obtida pela aproximação R.P.A., que leva em conta a ocupação dos níveis de Landau.

Comparamos nossos resultados teóricos para a massa ciclotrônica, inferida das transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$, com recentes dados experimentais de ressonância ciclotrônica. Para heterojunções determinamos o valor da massa de banda do elétron como sendo $m_b = 0,066 m_0$ e o coeficiente δ_2 como igual à unidade. Com esses valores obtivemos boa concordância entre os resultados teóricos e experimentais na região do limite quântico, onde $\nu < 1$. Nessa região só temos transições entre os níveis $n=0$ e $n=1$ e é por esse motivo que há um bom ajuste entre os resultados.

Com o mesmo valor de m_b , determinado para heterojunções, obtivemos também boa concordância entre os resultados teóricos e os experimentais para um poço quântico com baixa densidade eletrônica ($\nu < 1$). O melhor ajuste entre os resultados foi obtido para $\delta_2 = 0,95$, um valor menor que o determinado para

heterojunções. Isso nos leva a concluir que a não parabolicidade das bandas de condução é menor no poço quântico do que em heterojunções.

Até agora todas as medidas da massa ciclotrônica para heteroestruturas de GaAs foram realizadas na região abaixo da ressonância, porque os campos necessários para alcançar a região acima da ressonância, precisariam ser muito altos $B > 22 \text{ T}$. Por isso até agora a descontinuidade da massa de ciclotron não foi observada para estas estruturas.

Na segunda parte, calculamos as energias de ligação para o estado fundamental de uma impureza hidrogenóide localizada em um fio quântico de GaAs envolvido por AlGaAs de secção de área retangular. Para esse cálculo usamos um método variacional, considerando diferentes formas para a função de onda do sistema. Mostramos que a energia de ligação está fortemente relacionada às dimensões L_x e L_y do fio, às alturas das barreiras de potenciais e posições da impureza e que seus valores são maiores que em comparáveis poços quânticos Q2D.

Constatamos que fios quadrados e cilíndricos com alturas finitas das barreiras de potenciais e mesma área da secção transversal possuem energias de ligação aproximadamente iguais. As diferenças ficam por conta da geometria, sendo inferiores a 5% na região de fios finos ($L < 200 \text{ Å}$), quando as energias de ligação dos fios quadrados são calculadas com o uso da função variacional gaussiana. De nossas avaliações numéricas vimos que o efeito polarônico contribui significativamente (8,5 %) para a energia de ligação do sistema e portanto não pode ser desconsiderado.

REFERÊNCIAS

- 1.) L. Esaki e R. Tsu, IBM Res. Note, RC-2418 (1969)
- 2.) R. Dingle, A.C. Gossard e W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. Vol. 34, 1327 (1975)
- 3.) R.C. Miller, A.C. Gossard, D.A. Kleinman e O. Munteanu, Phys. Rev. B 29, 3740 (1984)
- 4.) P.M. Petroff, A.C. Gossard, R.A. Logan e W.W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 41, 635 (1982)
- 5.) M. Horst, U. Merkt e J.P. Kotthaus, Phys. Rev. Lett. 10, 754 (1983)
- 6.) J. Waldman, D.M. Larsen, P.E. Tannenwald, C.C. Bradley, B. Lax e D.R. Cohn, Phys. Rev. Lett. 23, 1033 (1969)
- 7.) S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 52, 859 (1984) e Phys. Rev. B 52, 1570E (1984)
- 8.) D.M. Larsen, Phys. Rev. B 30, 4595 (1984)
- 9.) F.M. Peeters e J.T. Devreese, Phys. Rev. B 31, 3689, (1985) e F.M. Peeters, Wu Xiaoguang e J.T. Devreese, Phys. Rev. B 33, 4338, (1986)
- 10.) G. Lindeman, W. Seidenbusch, R. Lassnig, J. Edlinger e E. Gornik, Physica, 117B & 118B, 649 (1983)
- 11.) H. Sigg, P. Wyder e J.J. Peremboun, Phys. Rev. B 31, 5253 (1985)
- 12.) M. Horst, U. Merkt, W. Zawadzky, J.C. Maan e K. Ploog, Solid State Comm. 53, 403 (1985)
- 13.) M.A. Hopkins, R.J. Nicholas e M.A. Brummel, Phys. Rev. B 36, 4789 (1987)
- 14.) W. Seidenbusch, Phys. Rev. B 36, 1877 (1987)

- 15.) R. Lassnig e W. Zawadzki Surf. Science, 142, 388 (1984)
- 16.) F. M. Peeters, W. Xiaoguang e J. T. Devreese EP2DS-VII-Santa Fé,
Surf. Scienc., 196, 437 (1988)
- 17.) W. Xiaoguang, F. M. Peeters e J. T. Devreese Phys. Rev B 34, 8800
(1986)
- 18.) G. Lindemann, R. Lassnig, W. Seidenbush e E. Gornik, Phys. Rev. B 28,
4693 (1983)
- 19.) S. Das Sarma e A. Madhukar, Phys. Rev. B 20, 2833 (1980)
- 20.) J. P. Vigneron, R. Evrard e E. Kartheuser, Phys. Rev B 18, 6930 (1978)
- 21.) T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern, Rev. Modern. Phys, 54, 437 (1982)
- 22.) F. Stern e Das Sarma, Phys. Rev. B 30, 840 (1984)
- 23.) W. Xiaoguang, F. M. Peeters e J. T. Devreese (comunicação privada,
pré-print)
- 24.) E. D. Palik, G. S. Picus, S. Teitler e R. F. Wallis, Phys. Rev., 122, 2, 475
(1961)
- 25.) M. Braun e U. Roosler, J. Phys. C 18, 3365 (1985)
- 25.a) W. Zawadzky e P. Pfeffer in Proceedings of the International
Conference on the Application of High Magnetic Fields in
Semiconductor Physics, Wurzburg (1986)
- 26.) J. Singleton, R. J. Nicholas, D. C. Rogers e C. T. B Foxon in
EP2DS-VII Santa Fé, Surf. Scinc, 196, 429 (1988)
- 27.) H. Sakaki, Jpn. J. Appl. Phys., 19, L735 (1980)
- 28.) M. H. Degani e O. Hilipólito, Phys. Rev. B 35, 9345 (1987)
- 29.) J. Lee e H. Spector, J. Appl. Phys., 54, 3921 (1983)
- 30.) J. Lee e M. O. Vassel, J. Phys. C 17, 2225 (1985)
- 31.) V. A. Chitta e G. Marques (comunicação particular)
- 32.) J. Lee e H. Spector, J. Vac. Sci. Technol. B2(1), 16 (1984)

- 33.) R. Loudon, Am. Jour. Phys. 27, 649 (1959)
- 34.) G. W. Bryant, Phys. Rev. B 29, 6632 (1984)
- 35.) J. A. Brum, Solid State Comm. 54, 179 (1985)
- 36.) G. W. Bryant, Phys. Rev. B 31, 7812 (1985)
- 37.) K. B. Wong, M. Jaros e J. P. Hagon, Phys. Rev B 35, 5, 2463 (1987)
- 38.) Polarons and Excitons (1962)
Scottish Universities Summer School, (Kuper, Whitfield)
- 39.) G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981)
- 40.) J. Lee, J. Appl. Phys. 54, 5482 (1983)