UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

INTERAÇÃO ELETRON-FONON EM
ESTRUTURAS SEMICONDUTORAS

Marcos Henrique Degani

Tese apresentada ao Instituto
de Física e Química de São
Carlos, para obtenção do título
de Doutor em Ciências "Física
Básica".

Orientador: Prof.Dr. Oscar Hipólito

São Carlos - 1988

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE MARCOS
HENRIQUE DEGANI APRESENTADA AO INSTITUTO DE
FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO,
EM 12 DE fevereiro DE 1988

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Oscar Hipólito (orientador)

Prof. Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

Prof. Dr. Paulo Sergio Soares Guimarães

Prof. Dr. Roberto Luzzi

Prof. Dr. Adalberto Fazzio

ÍNDICE

Lista de Figuras	i
Resumo	ii
Abstract	iii
Introdução	1
CAPÍTULO I - Polaron ligado à impurezas em poços quânticos	8
CAPÍTULO II - Exciton em poços quânticos de GaAs-AlGaAs	19
CAPÍTULO III - Excitons em fios quânticos de GaAs-AlGaAs	42
CAPÍTULO IV - Interação eletron-fonon em fios quânticos	53
CAPÍTULO V - Interação eletron-fonon interfacial	61
CAPÍTULO VI - Conclusões	107
REFERÊNCIAS	109

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1	- Energia de ligação em função da densidade eletrônica - impureza no centro	18
FIGURA 1.2	- Energia de ligação em função da densidade eletrônica - impureza na barreira	18
FIGURA 1.3	- Correção polarônica na massa efetiva-impureza no centro ...	18
FIGURA 1.4	- Correção polarônica na massa efetiva-impureza na barreira ..	18
FIGURA 2.1	- Energia de ligação - estado 1S- exciton pesado	32
FIGURA 2.2	- Energia de ligação - estado 1S - exciton leve	33
FIGURA 2.3	- Energia de ligação 2S e $2p_x$ - exciton pesado	34
FIGURA 2.4	- Energia de ligação - estado 2S e $2p_x$ - exciton leve	35
FIGURA 2.5	- Separação dos estados 1S e 2S - exciton pesado	36
FIGURA 2.6	- Separação dos estados 1S e 2S - exciton leve	37
FIGURA 2.7	- Energia de ligação - estado 1S em função da concentração de Al	38
FIGURA 2.8	- Energia de ligação - estados 2S e $2p_x$	39
FIGURA 2.9	- Correção polarônica na massa efetiva - exciton pesado	40
FIGURA 2.10	- Correção polarônica na massa efetiva - exciton leve	41

FIGURA 3.1	- Energia de ligação em função do lado Lx -exciton pesado	51
FIGURA 3.2	- Energia de ligação em função do lado Lx - exciton leve	52
FIGURA 4.1	- Energia polarônica em função do lado da Lz	59
FIGURA 4.2.	- Correção polarônica na massa efetiva em função do lado Lz ..	60
FIGURA 5.1	- Relação de dispersão dos fonons interfaciais AlAs-GaAs-AlAs..	86
FIGURA 5.2.	- Relação de dispersão dos fonons interfaciais GaSb-InAs-GaSb..	86
FIGURA 5.3.	- Correção polarônica no estado fundamental em função da espes- sura do poço - AlAs-GaAs	87
FIGURA 5.4	- Correção polarônica no estado fundamental em função da espes- sura do poço - GaSb-InAs	87
FIGURA 5.5	- Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do poço - AlAs-GaAs	88
FIGURA 5.6	- Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do poço - GaSb-InAs	88
FIGURA 5.7	- Relação de dispersão dos fonons interfaciais filmes de GaAs.	95
FIGURA 5.8	- Relação de dispersão dos fonons interfaciais filmes de InAs.	95
FIGURA 5.9	- Correção polarônica no estado fundamental em função da espessu- ra do filme de GaAs	96

FIGURA 5.10	- Correção polarônica no estado fundamental em função da espessura do filme de InAs	96
FIGURA 5.11	- Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do filme de GaAs	97
FIGURA 5.12	- Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do filme de InAs	97
FIGURA 5.13	- Níveis de energia na heterojunção AlGaAs-GaAs	104
FIGURA 5.14	- Energia polarônica em função da densidade na heterojunção AlGaAs-GaAs	105
FIGURA 5.15	- Correção polarônica na massa efetiva em função da densidade na heterojunção AlGaAs-GaAs	106

RESUMO

Nesta tese estuda-se a interação elétron (exciton) - fonon em várias estruturas semicondutoras tais como poços quânticos, heterojunções, fios quânticos e filmes semicondutores crescidos sobre um substrato semicondutor, através de um método variacional. Mostra-se que a interação elétron (exciton) - fonon LO é importante tanto nos poços quânticos como nos fios quânticos, aumentando a energia de ligação dos excitons e dos elétrons ligados à uma impureza hidrogênica doadora. No caso de elétrons ligados à uma impureza mostra-se que os efeitos de blindagem reduzem drasticamente a energia de ligação e os efeitos polarônicos. Nos fios quânticos, é mostrado que a interação elétron-fonon LO produz efeitos polarônicos sempre superiores aos produzidos em sistemas tridimensionais ou quase-bidimensionais. Estuda-se também os fonons interfaciais existentes em poços quânticos, heterojunções e filmes semicondutores. Obtem-se as relações de dispersão, o potencial de interação elétron-fonon interfacial e os efeitos polarônicos.

ABSTRACT

In this thesis we study the electron (exciton)-phonon interaction in some semiconductor structures such as quantum well, heterojunctions, quantum well wires and films of semiconductors using a variational approach.

It is showed that the electron (exciton)-phonon LO interaction is very important as in quantum well as in quantum well wire, increasing the binding energy of excitons and donor hydrogenic impurities. In the last case it is showed that screening plays a fundamental role bring down the binding energy and the polaronic corrections. Polaronic corrections in quantum well wires are calculated and are superior to corrections in three and quasi bidimensional systems.

Finally, the dispersion relation, interaction potential describing the electron-interface interaction and the polaronic effects are obtained for various systems.

INTRODUÇÃO

Os sistemas eletrônicos de dimensão reduzida têm sido intensamente estudados tanto do ponto de vista teórico como experimental. Este interesse é motivado, por um lado, pelo significado tecnológico de alguns destes sistemas (por exemplo: MOS) e por outro, pela possibilidade de aplicarmos leis físicas em sistemas reais com dimensionalidade menor que três. Estes sistemas eletrônicos existem próximos à interface de semicondutores (MOS, heterojunções) ou na superfície de hélio líquido. Dinamicamente os eletrons são bidimensionais uma vez que podem mover-se livremente paralelamente à interface e têm o movimento perpendicular quantizado por um potencial eletrostático. Experimentalmente tem se estudado estruturas semicondutoras constituídas por compostos dos grupos III-V e II-VI os quais são fracamente polares. Nestes materiais os eletrons polarizam a rede e o acoplamento com o campo de polarização induzido é chamado de polaron. Os efeitos polarônicos manifestam-se na massa efetiva, na energia, renormalizando as bandas de condução (valência) e na não parabolicidade da energia dos eletrons (buracos) na banda de condução (valência). Do ponto de vista experimental, os efeitos polarônicos são inferidos de experiências de ressonância ciclotrônica e de absorção em magneto-óptica. Nas experiências de ressonância ciclotrônica duas

situações são distinguidas: polaron não-ressonante, ou seja quando a frequência ciclotrônica ω_c é muito menor que a frequência dos fonons longitudinais ópticos (LO) ω_{LO} e polaron ressonante quando $\omega_c \approx \omega_{LO}$. Neste trabalho, entretanto estudaremos as correções polarônicas apenas no regime não ressonante. A diferença básica entre as duas técnicas experimentais é que a ressonância ciclotrônica estuda transições intrabanda e a absorção em magneto-óptica estuda transições interbanda. O acoplamento eletrôn-fonon LO é estimado através da constante de acoplamento α , introduzida por Fröhlich, a qual é aproximadamente igual a energia de polarização dividida pela energia do fonon LO. Nos materiais do grupo III-V, que estamos interessados $\alpha \ll 1$ (por exemplo: GaAs $\alpha = 0,07$, InSb $\alpha = 0,02$) assim sendo, poderemos tratar a interação eletrôn-fonon perturbativamente para obtermos a correção na energia e na massa efetiva.

Ressaltaremos agora algumas diferenças importantes existente entre o sistema bidimensional (2D) e o tridimensional (3D). Na aproximação estritamente bidimensional a extensão finita da função de onda é ignorada e o elétron é descrito por uma função delta na direção perpendicular à interface. O polaron bidimensional é definido como um elétron puramente bidimensional ou seja, confinado no plano e interagindo através da Hamiltoniana de Fröhlich com os fonons LO do volume. Se considerarmos que o sistema é diluído no sentido de que a densidade eletrônica é

baixa o suficiente para estudarmos apenas um eletrôn e desprezarmos os efeitos devido à não parabolicidade da banda de condução teremos a Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} (V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{\vec{k}} + h.c.) \quad (1)$$

onde $|V_{\vec{k}}|^2 = \frac{4\pi\alpha}{V} \frac{(\hbar\omega_{LO})^2}{k^2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}\right)^{1/2}$ em 3D e

$$|V_{\vec{k}}|^2 = \frac{2\pi\alpha}{A} \frac{(\hbar\omega_{LO})^2}{k} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}\right)^{1/2} \text{ em 2D.}$$

Através de teoria de perturbação podemos obter a relação de dispersão do polaron

$$E = -\alpha\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{3D}^*} - \frac{3}{40} \frac{\alpha}{\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 \text{ em 3D} \quad (2)$$

e

$$E = -\frac{\pi}{2} \alpha\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{2D}^*} - \frac{9\pi}{128} \frac{\alpha}{\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 \text{ em 2D,}$$

onde $m_{3D}^* = m(1 + \alpha/6)$ e $m_{2D}^* = m(1 + \pi\alpha/8)$.

Na tabela abaixo comparamos os efeitos polarônicos em duas e três dimensões.

	2D	3D	2D/3D
energia	$-\frac{\pi}{2} \alpha \hbar \omega_{LO}$	$-\alpha \hbar \omega_{LO}$	$\frac{\pi}{2} \sim 1,5$
massa	$\frac{\pi}{8} \alpha m$	$\frac{\alpha}{6} m$	$\frac{3\pi}{4} \sim 2,4$
não-parab.	$\frac{9\pi}{128} \frac{\alpha}{\hbar \omega_{LO}}$	$\frac{3}{40} \frac{\alpha}{\hbar \omega_{LO}}$	$\frac{15\pi}{16} \sim 3,0$

Como podemos observar da tabela acima, os efeitos polarônicos são maiores no sistema estritamente bidimensional do que no sistema tridimensional. Isto pode ser intuitivamente entendido como uma consequência do confinamento espacial do movimento eletrônico na direção z; a perda da regra de conservação do momento na direção z permite que os fonons com vetor de onda q_z arbitrário participe do processo de interação.

Neste trabalho estaremos interessados em estudar as correções polarônicas na ausência de campo magnético.

Da mesma maneira como os eletrons polarizam a rede e acoplam-se com a polarização auto-induzida os buracos também têm este mesmo comportamento e como um exciton é formado pela ligação de um par eletrôn-buraco as correções polarônicas em excitons

também podem ser calculadas e investigadas experimentalmente. Embora, como tivemos a oportunidade de observar, as contribuições polarônicas são pequenas elas são importantes na interpretação de vários resultados experimentais. Este trabalho está organizado da seguinte forma. No capítulo I estudamos os efeitos devido à interação elétron-fonon no estado fundamental de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica doadora isolada no interior de um poço quântico de GaAs-GaAlAs em função da densidade eletrônica, da espessura do poço quântico e da posição da impureza. Os efeitos de blindagem tanto no potencial coulômbico da impureza como na interação elétron-fonon longitudinal óptico são descritos na aproximação das fases aleatórias (RPA). Mostramos que as contribuições polarônicas na energia de ligação é significativa e importante na comparação com os resultados experimentais. No capítulo II estudamos os efeitos polarônicos em excitons confinados em poços quânticos. Através de um método variacional calculamos a energia do estado fundamental ($1s$) e os estados excitados $2s$ e $2p_x$ para várias concentrações de alumínio e espessuras de poços. Mostramos que a interação exciton-fonon longitudinal óptico é muito significativa nos dois tipos de excitons existentes neste sistema; excitons leves e excitons pesados. Nossos resultados são comparados com vários resultados experimentais e um acordo muito bom é obtido. Calculamos também a correção polarônica na massa efetiva total paralela às interfaces. O capítulo III é dedicado ao cálculo da

energia de ligação de excitons quase-unidimensionais através de um método variacional. Este sistema é constituído por um fio de GaAs extremamente fino embebido em GaAlAs e é conhecido como fio quântico (QWW-quantum well wire) devido às suas dimensões (tipicamente $200 \times 200 \text{ \AA}$). Neste sistema mostramos que a energia de ligação do estado fundamental é aumentada em relação ao sistema quase-bidimensional (poços quânticos). Incluímos também nos cálculos a interação exciton-fonon e mostramos que esta interação é importante e não pode ser desprezada. Continuando a explorar os sistemas quase-unidimensionais calculamos no capítulo IV os efeitos polarônicos em um eletrón confinado em um fio quântico e interagindo com os fonons longitudinais ópticos do volume do GaAs. Utilizando teoria de perturbação de segunda ordem, calculamos a energia e a massa efetiva do polaron em função dos lados L_x e L_y do fio de GaAs. É mostrado que as correções polarônicas neste sistema é sempre maior que no sistema tridimensional contrastando com os resultados quase-bidimensionais que podem ser menores que no sistema tridimensional. Finalmente, no capítulo V estudamos a influência das interfaces nos modos de polarização de alguns sistemas constituídos por semicondutores. Obtemos as relações de dispersão dos modos localizados nas interfaces, o potencial de interação eletrón-fonons ópticos interfaciais e as correções polarônicas tanto na energia como na massa efetiva devido ao acoplamento eletrón-fonons interfaciais. Mostramos que em alguns sistemas, as

correções polarônicas devido à interação eletron-fonons interfaciais são mais importantes que a interação com os modos do volume.

Em conclusão, mostramos neste trabalho que a interação eletron (exciton)-fonon óptico é importante e não pode ser desprezada para uma análise quantitativa com os resultados experimentais.

CAPÍTULO I

POLARON LIGADO A IMPUREZAS EM POÇOS QUÂNTICOS

As propriedades eletrônicas de sistemas de baixa dimensionalidade como poços quânticos, super-redes e heterojunções têm recebido uma grande atenção tanto do ponto de vista teórico como experimental⁽¹⁾. Com as modernas técnicas de crescimento tais como MBE e MOCVD tem sido possível obter heterojunções de semicondutores de alta qualidade. Em poços quânticos de alta qualidade, livres de defeitos e impurezas, os eletrons movem-se livremente na direção paralela à interface e são ligados na direção de crescimento destas estruturas. Isto leva a formação de subbandas quase-bidimensionais e modifica a densidade de estados. Embora o número de impurezas possa ser extremamente reduzido muitas vezes dopa-se propositalmente estas estruturas e o dopante pode localizar-se nas barreiras de potencial ou mesmo dentro dos poços. Como resultado desta dopagem o poço quântico pode ter eletrons livres os quais blindam o potencial das impurezas. Desde que a densidade de estados neste sistema difere muito da densidade de estados do volume (bulk) esperamos modificações significativas nos estados ligados à uma

impureza. Existem vários trabalhos teóricos e experimentais explorando este tema⁽²⁻⁶⁾. Bastard⁽²⁾ foi o primeiro a calcular a energia de ligação do estado fundamental de uma impureza hidrogênica dentro do poço. Neste cálculo foi considerado um modelo simples em que as barreiras de potencial são infinitas. Mailhiot e colaboradores⁽³⁾ e Greene e Bajaj⁽⁴⁾ estudaram o efeito da altura finita da barreira de potencial. Tanaka e colaboradores⁽⁵⁾ investigaram a energia de ligação para uma impureza localizada fora do poço, ou seja, na barreira. Os efeitos de blindagem devido à presença de elétrons livres no poço foram tratados por Brum e colaboradores⁽⁶⁾ que calcularam a energia de ligação em função da densidade eletrônica. Os resultados experimentais são explicados por estes modelos teóricos e têm uma boa concordância; os resultados teóricos ficam em média 5% abaixo dos resultados experimentais. Embora esta discrepância possa ser explicada pela incerteza na determinação de vários parâmetros como a largura do poço, a posição da impureza, etc, que entram nos cálculos, os modelos teóricos negligenciam a interação elétron-fonon longitudinais ópticos (LO) do GaAs.

Neste capítulo, usando um formalismo variacional, calculamos a energia de ligação de uma impureza hidrogênica isolada localizada no centro e na barreira de um poço quântico de GaAs-Al_xGa_{1-x}As em função da densidade eletrônica para várias larguras de poços. Os efeitos de blindagem da impureza e do acoplamento elétron-fonon pelos elétrons livres presentes no poço são

descritos dentro da aproximação das fases aleatórias (RPA). Mostramos que os efeitos polarônicos são importantes, aumentando a energia de ligação e portanto, diminuindo a discrepância existente entre teoria e experimentos.

Vamos considerar uma única impureza hidrogênica localizada em $z = z_i$ dentro de um poço quântico de GaAs-AlGaAs, na aproximação de barreiras infinitas, com largura L e uma densidade de eletrons livres n_e . Na aproximação de massa efetiva a Hamiltoniana de um eletron ligado à uma impureza doadora hidrogênica e acoplado com os fonons LO do GaAs é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(z) + V_s(\vec{r}) + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \Gamma_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} (a_{\vec{q}}^{\dagger} + a_{-\vec{q}}) \quad (1)$$

onde $\vec{p} = (\vec{P}, p_y)$ e $\vec{r} = (\vec{R}, z)$ são o momentum e a coordenada do eletron respectivamente, m é a massa de banda. $V_s(\vec{r})$ é o potencial coulômbico da impureza blindada calculado na aproximação das fases aleatórias (RPA). $a_{\vec{q}}^{\dagger}$ ($a_{\vec{q}}$) é o operador de criação (destruição) de um fonon LO de vetor de onda $\vec{q} = (\vec{Q}, q_y)$ e frequência ω_{LO} e $\Gamma_{\vec{q}}$ é o coeficiente de Fourier da interação eletrôn-fonon blindada.

Para calcularmos a energia do estado fundamental escolhemos uma função de onda com um parâmetro variacional λ ,

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{2}{\pi\lambda^2}\right)^{1/2} \phi(z) e^{-R/\lambda} |10\rangle \quad (2)$$

onde $\phi(z)$ é a função de onda de um poço quadrado de largura L e barreiras infinitas,

$$U = \exp\left[\sum_{\vec{q}} (f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} - f_{\vec{q}}^* a_{\vec{q}})\right] \quad (3)$$

é uma transformação canônica a qual desloca as coordenadas dos fonons e $|10\rangle$ representa o estado com zero fonons presentes. Na equação (3) as funções $f_{\vec{q}}$ são determinadas minimizando a energia do estado fundamental.

O potencial coulômbico blindado $V_s(\vec{r})$, analisado nas componentes de Fourier $V_s(\vec{Q}, z) \cdot \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R})$ é dado por

$$\bar{V}_s = \langle \psi | V_s(\vec{r}) | \psi \rangle = \frac{2}{\pi\lambda^2} \int d\vec{R} e^{-2R/\lambda} \int \frac{d\vec{Q}}{(2\pi)^2} \bar{V}_s(\vec{Q}) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} \quad (4)$$

onde

$$\bar{V}_s(\vec{Q}) = \langle \phi(z) | V(\vec{Q}, z) | \phi(z) \rangle = \frac{-2\pi e^2}{\epsilon_0 Q \epsilon(Q)} \langle \phi(z) | e^{-Q|z-z_i|} | \phi(z) \rangle \quad (5)$$

onde ϵ_0 é a constante dielétrica estática do GaAs, z_i a posição

da impureza e $\epsilon(Q)$ a função dielétrica estática do sistema eletrônico quase-bidimensional ⁽⁷⁾ dada, na aproximação das fases aleatórias, por

$$\epsilon(Q) = 1 + \frac{2}{Q_0^* Q} G(Q) \cdot F(Q), \quad (6)$$

onde $Q_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m^* e^2}$ é o raio de Bohr efetivo. $G(Q)$ é uma função que considera o tamanho da superfície de Fermi

$$G(Q) = 1 - \Theta(Q - 2Q_F) \sqrt{1 - (2Q_F/Q)^2}, \quad (7)$$

onde $\Theta(x)$ é a função degrau e $Q_F = \sqrt{2\pi n_e}$ onde n_e é a densidade eletrônica. $F(Q)$ é o fator de forma associado à quase-bidimensionalidade e é dado por

$$F(Q) = \int dz \int dz' |\phi(z)|^2 e^{-Q|z-z'|} |\phi(z')|^2. \quad (8)$$

Se usarmos a função de onda do poço quadrado de largura L e barreiras infinitas teremos

$$F(u) = 2 \frac{(u^2 + 8\pi^2)}{(u^2 + 4\pi^2)^2} (1 - e^{-u}) + \frac{u}{u^2 + 4\pi^2} + \frac{2}{u} \left[1 - \frac{1}{u} (1 - e^{-u}) \right] \quad (9)$$

com $u = Q \cdot L$.

Vamos considerar agora a contribuição na energia de ligação. Como a constante de acoplamento α que caracteriza a

intensidade da interação elétron-fonon do GaAs é pequena, $\alpha = 0,07$, os cálculos da energia polarônica assim como a massa efetiva podem ser obtidas utilizando o método variacional proposto por Lee, Low e Pines⁽⁸⁾.

A interação elétron-fonon blindada pela função dielétrica estática na aproximação das fases aleatórias é utilizada para obtermos o deslocamento na energia E_p e na massa efetiva Δm as quais são dadas pelas expressões

$$E_p = -64 \alpha \hbar \omega_{LO} \int_0^{+\infty} dx \frac{F(x)}{(1 + \lambda^2 x^2 / r_p^2) \epsilon(x)^2} \quad (10)$$

$$e \quad \Delta m = 128 \alpha m \int_0^{+\infty} dx \frac{x^2 F(x)}{(1 + \lambda^2 x^2 / r_p^2)^3 \epsilon(x)^2} \quad (11)$$

onde $r_p = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/2}$ é o raio do polaron.

A energia do estado fundamental $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ tem a seguinte forma,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\tilde{n}^2}{L^2} + \frac{1}{4\lambda^2} \right) + \bar{V}_s + E_p \quad (12)$$

onde $\bar{V}_s$ e E_p são dadas pelas equações (4) e (10),

respectivamente. Minimizando E em relação ao parâmetro λ obtemos o estado fundamental do sistema. A diferença entre o valor obtido e o valor da energia do sistema sem a presença da impureza é a energia de ligação do estado fundamental de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica doadora.

Os resultados que obtivemos minimizando a equação (12) numericamente, com e sem a interação elétron-fonon, para várias larguras de poços estão mostradas nas figuras (1) e (2) em função da densidade eletrônica. Na figura (1) a impureza encontra-se no centro do poço e na figura (2) na barreira. Também mostramos na tabela I a contribuição percentual dos efeitos polarônicos para diferentes larguras de poços, densidade eletrônica e posição da impureza. Como podemos observar, para uma dada espessura do poço, a contribuição polarônica diminui com o aumento da densidade eletrônica e para uma dada densidade eletrônica a contribuição polarônica é maior para poços estreitos. Dos resultados da tabela I podemos notar que para uma dada largura de poço e baixa densidade eletrônica, o deslocamento na energia devido ao acoplamento elétron-fonon é maior quando a impureza está localizada na barreira. Por outro lado, para uma densidade eletrônica alta esta situação é invertida e as correções polarônicas são maiores para a impureza localizada no centro do poço. Nas figuras (3) e (4) mostramos a correção polarônica na massa efetiva do elétron ligado à impureza em função da densidade eletrônica para várias larguras de poços e

para as duas posições da impureza, no centro e na barreira, em ambos os casos os resultados são similares aos da energia. Para uma dada espessura do poço, no limite de baixa densidade eletrônica (10^{10} cm^{-2}) a correção na massa efetiva é praticamente independente da densidade e diminui com o aumento da densidade até atingir um valor de saturação. Note entretanto que este valor de saturação depende da espessura do poço. Uma diferença importante existente entre este sistema e o tridimensional (3D) é que Q_F^{3D} é dependente da densidade eletrônica, esta diferença implica que o potencial coulômbico blindado pode não ter um estado ligado se a densidade eletrônica for maior que uma densidade crítica tal que $Q_F^{3D} Q_0^* \approx 1$. Nos sistemas quase-bidimensionais como Q_{TF} é constante teremos sempre um estado ligado, ou seja, a energia satura em um valor finito quando a densidade eletrônica é grande.

Em conclusão, neste capítulo calculamos as correções polarônicas na energia de ligação de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica doadora localizada ou no meio do poço ou na barreira, na aproximação de barreiras infinitas e as correções na massa efetiva devido à interação elétron-fonon. Mostramos que esta interação aumenta a energia e a massa efetiva do elétron ligado à impureza e que os efeitos de blindagem reduzem drasticamente estes valores. Nas figuras (1) e (2) mostramos os resultados para a energia de ligação para uma impureza localizada no centro do poço e na barreira, respectivamente, em função da

densidade eletrônica para várias espessuras do poço e nas figuras (3) e (4) mostramos os resultados para a massa efetiva.

Tabela I- Deslocamento percentual da energia de ligação $\Delta E_B = [(E_B^* - E_B)/E_B] \times 100$, onde E_B^* e E_B são as energias com e sem o acoplamento eletron-fonon, respectivamente, para diferentes espessuras L do poço e vários valores da densidade eletrônica. A impureza está localizada ou na barreira (B) ou no centro do poço (C).

L (Å)	n_e (cm ⁻³) Impurity position	10 ⁷		10 ⁸		10 ⁹		10 ¹⁰		10 ¹¹		10 ¹²	
		B	C	B	C	B	C	B	C	B	C	B	C
0		9.7	9.7	9.7	9.7	9.6	9.6	9.3	9.3	8.2	8.2	5.5	5.5
25		9.8	9.2	9.7	9.1	9.5	8.9	8.9	8.5	5.9	6.8	3.9	4.7
50		9.9	8.9	9.8	8.8	9.6	8.6	8.8	8.0	4.6	6.0	3.5	4.3
100		10.3	8.6	10.2	8.3	9.9	8.1	8.6	7.4	3.3	5.0	2.2	3.9

Figuras 1 e 2 - Energia de ligação de uma impureza hidrogênica blindada localizada ou no centro ou na barreira ($z_i = L/2$) de um poço quântico de barreiras infinitas em função da densidade eletrônica, para várias espessuras de poços. As linhas cheias e as tracejadas correspondem ao caso com e sem a interação eletrôn-fonon. A curva $L=0$ representa um gás de elétrons bidimensionais.

Figuras 3 e 4 - Correção polarônica na massa efetiva de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica blindada, localizada ou no centro ou na barreira ($z_i = L/2$) de um poço quântico de barreiras infinitas para várias espessuras de poços.

CAPÍTULO II

EXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-GaAlAs

(9)
Desde o trabalho pioneiro de Dingle e colaboradores em 1974 sobre as propriedades ópticas de poços quânticos de GaAs, tem havido um enorme interesse no estudo de excitons nestes sistemas quase-bidimensionais. Em tais estruturas a presença de uma descontinuidade nas bandas de energia na interface entre as duas camadas de semicondutores, remove a degenerescência das bandas de valência do GaAs originando dois tipos de excitons: os excitons leves formados por buracos leves e os excitons pesados formados por buracos pesados. Estes excitons têm sido observados e apresentam transições bem resolvidas tanto em absorção (10) como em emissão (11).

Até o momento as explicações experimentais e teóricas para estes excitons leves e pesados têm sido matéria de considerável debate e controvérsias. Os valores das energias de ligações obtidas por experimentos de fotoluminescência (12-14) são menores do que os valores obtidos por experimentos de magneto-óptica (15-16). Mais recentemente Rogers e colaboradores (17) estudaram detalhadamente um novo conjunto de experimentos usando magneto-óptica para inferir as energias de ligações dos excitons leves e

pesados em poços quânticos de GaAs e mostraram que no limite de campo magnético fraco os resultados para a energia ligação estão em concordância com os resultados obtidos por experimentos de fotoluminescência obtidos por Miller e colaboradores⁽¹²⁾. Mais recentemente Dawson e colaboradores⁽¹⁴⁾ determinaram através de experimentos de fotoluminescência a separação entre os estados 1s e 2s dos excitons leves e pesados para vários valores de concentração de alumínio assim como para várias espessuras de poços. Do ponto de vista teórico, os cálculos para estas energias de ligações têm sido feitos através de métodos variacionais ou retendo somente os termos diagonais na Hamiltoniana de Luttinger-Kohn⁽¹⁸⁾ ou levando em conta a interação entre as bandas de buracos leves e pesados.⁽¹⁹⁾ Recentemente Chitta e colaboradores⁽²⁰⁾ têm generalizado este problema incluindo também as interações entre as bandas de valência e condução. Entretanto estes modelos têm previsto energias com valores menores aos resultados experimentais tanto para experimentos de fotoluminescência como para experimentos de magneto-óptica, com exceção ao trabalho de Dawson e colaboradores que utilizam a massa do buraco pesado paralela à interface 0,18 m_0 em vez de 0,1 m_0 . Na tentativa de resolver este impasse entre os resultados teóricos e experimentais, incluímos nos cálculos a contribuição na energia de ligação devido à interação exciton-fonons longitudinais ópticos do GaAs e mostramos que esta interação é muito importante. Neste capítulo, calculamos a energia de ligação dos

excitons leves e pesados nos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ em função da concentração de alumínio e espessura dos poços e mostramos que os efeitos polarônicos são importantes para uma comparação quantitativa entre experiência e teoria.

Na aproximação de massa efetiva, consideraremos apenas os termos diagonais da Hamiltoniana de Luttinger-Kohn o que significa considerar os excitons leves desacoplados dos excitons pesados e negligenciaremos qualquer efeito de não parabolicidade tanto na banda de valência como na banda de condução (Todos estes efeitos desprezados aqui são considerados no trabalho de Chitta, Degani, Marques e Cohen⁽²⁰⁾). A Hamiltoniana de um exciton associado com a banda de buracos leves e com a banda de buracos pesados em um poço quântico de GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs de largura L e interagindo com os fonons logitudinais ópticos do GaAs é dada por

$$H = E_g + \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_{lh}^2}{2m_{\pm}} + \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu_{\pm}} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + H_{int} - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{r} + (\vec{z}_e - \vec{z}_h)|} \quad (1)$$

onde

$$H_{int} = \sum_{\vec{q}} \left\{ \Gamma_{\vec{q}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} \left[e^{i\beta_h \vec{Q} \cdot \vec{r}} e^{i q_z z_e} - e^{-i\beta_e \vec{Q} \cdot \vec{r}} e^{i q_z z_h} \right] a_{\vec{q}}^{\dagger} + h.c. \right\} \quad (2)$$

E_G é a diferença de energia entre a banda de condução e a banda de valência do GaAs, m_e é a massa efetiva do elétron, $m_{\pm}$ é a massa do buraco pesado (+) ou do buraco leve (-) na direção z , $\mu_{\pm}$ é a massa reduzida do exciton pesado (+) ou do exciton leve (-) na direção perpendicular à z e $M = m_e + m_h$ é a massa total do exciton também na direção perpendicular à z . $\hat{a}_{\vec{q}}^+$ ($\hat{a}_{\vec{q}}$) é o operador de criação (destruição) de um fonon longitudinal óptico de vetor de onda $\vec{q} = (\vec{Q}, q_z)$ e frequência ω_{LO} . $(\vec{r}, \vec{p})$ são as projeções da posição relativa e do momentum na direção perpendicular à z e $(\vec{R}, \vec{P})$ são as projeções da posição do centro de massa e do momentum do centro de massa na direção perpendicular à z , respectivamente. $V_e(z_e)$ e $V_h(z_h)$ são os poços de potencial para o elétron na banda de condução e para o buraco na banda de valência respectivamente, os quais são poços quadrados de largura L e são dados por

$$V_e(z_e) = \begin{cases} 0 & \text{se } z_e < L/2 \\ V_e & \text{se } z_e > L/2 \end{cases} \quad (3)$$

e

$$V_h(z_h) = \begin{cases} 0 & \text{se } z_h < L/2 \\ V_h & \text{se } z_h > L/2 \end{cases} \quad (4)$$

Os valores para as alturas das barreiras de potencial para os eletrons (v_e) e para os buracos (v_h) são determinadas através da concentração x de alumínio na expressão para a descontinuidade no gap de energia $\Delta E_g = 1,155x + 0,37x^2$ eV. Os valores v_e e v_h usados são 60% e 40% de ΔE_g respectivamente.

Γ_q é o coeficiente de Fourier da interação eletrôn e buraco-fonon longitudinal óptico e é dado por

$$\Gamma_q = \frac{-i\hbar\omega_{LO}}{q} \left[\frac{2\pi}{\Omega} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{\hbar\omega_{LO}} \right] \quad (5)$$

onde Ω é a unidade de volume, ϵ_∞ e ϵ_0 são as constantes dielétricas óptica e estática do GaAs, $\beta_e = m_e / M$ e $\beta_h = m_h / M$.

A equação (1) representa a interação de um eletrôn e um buraco confinados em um poço quântico através do potencial coulômbico blindado pela constante dielétrica óptica enquanto cada um deles também interage com os fonons longitudinais ópticos do GaAs. A Hamiltoniana, equação (1), é uma generalização do sistema tratado no capítulo I ou seja de um polaron ligado à uma impureza hidrogênica doadora.

Para calcularmos a energia de ligação dos excitons formados por um eletrôn e um buraco (leve ou pesado) ocupando o estado fundamental das sub-bandas usaremos um cálculo variacional. As funções de onda para os estados 1s, 2s e $2p_x$ são da forma

$$\psi^{1s}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \left(\frac{\delta^2}{2\pi} \right)^{1/2} \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) e^{-\delta^2/2} U|0\rangle, \quad (6)$$

$$\psi^{2s}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{\lambda}{\sqrt{6\pi}} (1 - \lambda^2) \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) e^{-\lambda^2/2} U|0\rangle \quad (7)$$

$$\psi^{2p}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{\xi^2}{\sqrt{6\pi}} \sin \theta \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) e^{-\xi^2/2} U|0\rangle \quad (8)$$

onde $\varphi_e(z_e)$ e $\varphi_h(z_h)$ são as funções de onda do estado fundamental das sub-bandas do poço quadrado e são dadas por

$$\varphi(z) = \begin{cases} A \cos(K_{in} z) & \text{se } |z| < L/2 \\ B \exp(-K_{ex}|z|) & \text{se } |z| > L/2 \end{cases} \quad (9)$$

onde os parâmetros A , B , K_{in} e K_{ex} são obtidos na maneira usual, mas como as massas efetivas tanto do elétron como dos buracos são diferentes nos dois materiais precisamos impor a conservação da corrente através das interfaces.

Nas equações (6), (7) e (8), U é uma transformação unitária que desloca as coordenadas dos fônons

$$U = \exp \left[\sum_{\vec{q}} \left(f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^+ - f_{\vec{q}}^* a_{\vec{q}} \right) \right] \quad (10)$$

e $|0\rangle$ representa o estado sem fonons. As funções variacionais $f_{\vec{q}}$ e os parâmetros variacionais δ , λ e ξ são obtidos minimizando as energias dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ respectivamente.

Antes de calcularmos o valor esperado da Hamiltoniana eliminamos a coordenada $\vec{R}$ do centro de massa através da transformação canônica U_1

$$U_1 = \exp(-i\vec{R} \cdot \sum_{\vec{q}} \vec{q} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}}) \quad (11)$$

O valor esperado da Hamiltoniana transformada, $H^* = U_1^{-1} H U_1$, pode ser escrito na seguinte forma

$$E = \langle \psi | H^* | \psi \rangle$$

$$E = E_{\vec{q}} + \frac{\hbar^2}{2\mu_{\pm}} \left(\frac{\tilde{\eta}^2}{L^2} + \frac{\theta^2}{4} \right) + E_{\text{Coul}} + E_{\text{pol}} \quad (12)$$

onde $\theta = \delta$, λ ou ξ para os estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ respectivamente e E_{Coul} e E_{pol} são as contribuições para a energia devido à interação coulômbica e com os fonons respectivamente. Estes termos são dados por

$$E_{\text{Coul}}^{1s} = - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} \tilde{r}_p} \int_0^{+\infty} dx \frac{F_{eh}(x)}{[1 + (x/\delta \tilde{r}_p)^2]^{3/2}}, \quad (13)$$

$$E_{\text{Coul}}^{2S} = - \frac{e^2 \lambda^3}{\epsilon_{\infty} r_p} \int_0^{+\infty} dx F_{eh}(x) \frac{\lambda^4 + x^4 - 3x^2 \lambda^2}{(\lambda^2 + x^2)^{7/2}}, \quad (14)$$

$$E_{\text{Coul}}^{2P_x} = - \frac{e^2 \zeta'^5}{\epsilon_{\infty} r_p} \int_0^{+\infty} dx F_{eh}(x) \frac{2\zeta'^2 - 3x^2}{(\zeta'^2 + x^2)^{7/2}}, \quad (15)$$

$$E_{\text{pol}}^{1S} = - \hbar \omega_{LO} \frac{r_p}{a_0^*} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{1}{1 + \mu_{\pm} x^2 / M}.$$

$$\cdot \left[H_e^{1S}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{1S}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{1S}(x) H_h^{1S}(x) F_{eh}(x) \right], \quad (16)$$

$$E_{\text{pol}}^{2S} = - \hbar \omega_{LO} \frac{r_p}{a_0^*} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{1}{1 + \mu_{\pm} x^2 / M}.$$

$$\cdot \left[H_e^{2S}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{2S}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{2S}(x) H_h^{2S}(x) F_{eh}(x) \right] \quad (17)$$

$$e \quad E_{\text{pol}}^{2P_x} = - \hbar \omega_{LO} \frac{r_p}{a_0^*} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{1}{1 + \mu_{\pm} x^2 / M}.$$

$$\left[H_e^{2P_x}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{2P_x}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{2P_x}(x) H_h^{2P_x}(x) F_{eh}(x) \right] \quad (18)$$

onde $r_p = (\hbar / 2 \mu_{\pm} \omega_{LO})^{1/2}$ é o raio do exciton-polaron,
 $\lambda' = \lambda r_p$, $\delta' = \delta r_p$ e $\zeta' = \zeta r_p$.

e $a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_\infty}{\mu_+ e^2}$ é o raio de Bohr efetivo calculado com a massa reduzida na direção perpendicular à direção z, $F_{ij}(Q)$ é o fator de forma associado ao confinamento quase-bidimensional dos eletrons e buracos o qual é definido por

$$F_{ij}(Q) = \int dz \int dz'' |\varphi_i(z)|^2 \exp(-Q|z-z''|) |\varphi_j(z'')|^2 \quad (19)$$

e

$$H_i^l(Q) = \langle \psi_i^l | \exp(i\beta_i \vec{\alpha} \cdot \vec{P}) | \psi_i^l \rangle \quad (20)$$

onde $l = 1s, 2s, 2p$ e $i = e, h$.

É interessante notar que no limite em que $m_h \rightarrow \infty$ (isto é, $\beta_e \rightarrow 0$ e $\beta_h \rightarrow 1$) recuperamos o problema de um eletron ligado à uma impureza hidrogênica doadora. Neste limite, o efeito da transformação canônica é eliminar a coordenada do eletron perpendicular à direção z na equação (1) e substituir a blindagem no termo coulômbico de ϵ_∞ para ϵ_0 . A energia de ligação do exciton é obtida através da diferença entre a energia do eletron e do buraco confinados nos poço quântico sem interação coulômbica e a energia obtida minimizando-se as expressões (12). Os cálculos da equação (12) foram executados numericamente e a minimização da energia foi realizada com e sem a interação exciton-fonon. Os valores dos parâmetros físicos utilizados nos cálculos são $\epsilon_0 = 12,5$, $m_e = 0,0665$, $\mu_+ = 0,04 m_0$, $\mu_- = 0,05 m_0$ e

$\hbar\omega_{LO} = 36,7 \text{ meV}$ onde m_0 é a massa do elétron livre.

Os resultados obtidos para a energia de ligação dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ com e sem a contribuição dos fonons estão mostradas nas figuras (1 à 6). Nas figuras (1) e (2) mostramos a energia de ligação do estado $1s$ para o exciton pesado e para o exciton leve respectivamente. Nas figuras (3) e (4) mostramos as energias de ligações dos estados $2s$ e $2p_x$ para o exciton pesado e para o exciton leve respectivamente e nas figuras (5) e (6) mostramos a diferença entre a energia do estado $1s$ e a energia do estado $2s$ para o exciton pesado e para o exciton leve, respectivamente. Nestas figuras mostramos a energia de ligação em função da largura do poço para as concentrações de alumínio $x = 0,15$ e $x = 0,30$, mostramos também o modelo de barreiras infinitas. Existem várias características interessantes a serem notadas. Primeiramente, observamos que para uma dada concentração x de alumínio a energia de ligação dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ aumentam com a diminuição da espessura do poço, atingem um máximo e finalmente diminuem com a diminuição da espessura do poço tendendo para o valor da energia de ligação do exciton tridimensional na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Segundo, a energia de ligação dos excitons leves são sempre superiores à energia de ligação dos excitons pesados. Terceiro, no modelo de barreiras infinitas os estados $2s$ e $2p_x$, no limite estritamente bidimensional são degenerados. Devido à interação exciton-fonon esta degenerescência é levantada analogamente ao sistema

tridimensional. O "Lamb shift" existente nos excitons tri e bidimensionais tem sinal oposto ao que ocorre no átomo de hidrogênio, ou seja, a energia do estado $2p_x$ é maior que a do estado $2s$, isto ocorre porque no átomo de hidrogênio a interação é com o campo de fótons (transversais) e no exciton a interação é com o campo de fonons (longitudinais). Como podemos observar a energia de ligação do estado $2p_x$ é muito pouco sensível à variação da espessura do poço assim como em relação à concentração de alumínio.

Nas figuras (7) e (8) mostramos a energia dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ dos excitons leves e pesados, para um poço com $50 \text{ \AA}$ de espessura, em função da concentração x de alumínio. Como podemos observar a energia dos estados $2s$ e $2p_x$ são pouco sensíveis à concentração de alumínio, enquanto a energia do estado $1s$ tem uma dependência mais acentuada.

Na tabela I comparamos nossos resultados para a diferença entre a energia do estado $1s$ e $2s$, considerando a interação exciton-fonon com os resultados experimentais de Dawson e colaboradores⁽¹⁴⁾.

TABELA I

L (Å)	x	HHexp	Calc	LHexp	Calc
75	0,40	9,5	9,0	10,3	10,1
92	0,35	8,5	8,5	10,2	9,4
112	0,35		...	9,1	8,7

L é a espessura do poço, x a concentração de alumínio, HHexp (LHexp) é a diferença de energia, para os excitons pesados (leves), entre os estados 1s e 2s experimental, Calc são os nossos resultados com a interação exciton-fonon.

Finalmente, calculamos a correção polarônica na massa efetiva total perpendicular à direção z dos excitons leves e pesados. Usando o mesmo formalismo do capítulo I, obtemos as seguintes expressões para as correções na massa efetiva nos estados 1s, 2s e 2p_x

$$\frac{\Delta M^{1s}}{M} = \frac{\mu_{\pm}}{2M} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{\left(1 + \frac{\mu_{\pm}}{M} x^2 \right)^3} \cdot \left[H_e^{1s}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{1s}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{1s}(x) H_h^{1s}(x) F_{eh}(x) \right], \quad (21)$$

$$\frac{\Delta M^{2s}}{M} = \frac{\mu_{\pm}}{2M} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{\left(1 + \frac{\mu_{\pm}}{M} x^2 \right)^3} \cdot \left[H_e^{2s}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{2s}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{2s}(x) H_h^{2s}(x) F_{eh}(x) \right] \quad (22)$$

$$^e \frac{\Delta M^{2p_x}}{M} = \frac{\mu_{\pm}}{2M} \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_0} \right) \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{\left(1 + \frac{\mu_{\pm}}{M} x^2 \right)^3} \cdot \left[H_e^{2p_x}(x)^2 F_{ee}(x) + H_h^{2p_x}(x)^2 F_{hh}(x) - 2 H_e^{2p_x}(x) H_h^{2p_x}(x) F_{eh}(x) \right]. \quad (23)$$

Onde os parâmetros δ , λ e ξ são os mesmos que minimizaram a energia total respectivamente do estado $1s$, $2s$ e $2p_x$.

Nas figuras (9) e (10) mostramos as correções polarônicas na massa efetiva total perpendicular à direção z dos excitons pesados e leves respectivamente, em função da espessura L do poço para as concentrações 0,15 e 0,30. Mostramos também os resultados obtidos usando o modelo de barreiras infinitas. As correções polarônicas na massa efetiva têm qualitativamente o mesmo comportamento que as energias de ligações, aumentam com a diminuição da espessura do poço até atingirem um máximo, depois diminuem monotonicamente. A contribuição maior é no estado $2p_x$ e a contribuição menor é no estado $2s$.

Em conclusão, estudamos neste capítulo a energia de ligação de excitons confinados em poços quânticos de $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{AlAs}$. Calculamos a energia dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ em função da largura do poço e concentração de alumínio para os excitons leves e pesados. Incluímos nos cálculos a interação exciton-fonon longitudinal óptico do GaAs e mostramos que esta correção é muito importante e não pode ser desprezada para uma análise quantitativa da energia de ligação. Calculamos também as correções polarônicas na massa efetiva total paralela à interface nos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$.

Figura 1 - Energia de ligação, estado $1s$, de um exciton pesado em função da espessura do poço para as concentrações de alumínio $x=0,15$ e $x=0,30$ e para barreiras infinitas. As linhas cheias e as linhas tracejadas correspondem aos casos com e sem a interação com os fonons LO respectivamente.

Figura 2 - Energia de ligação, estado $1s$, de um exciton leve em função da espessura do poço para as concentrações de alumínio $x=0,15$, $x=0,30$ e para barreiras infinitas. As linhas cheias e as linhas tracejadas correspondem aos casos com e sem a interação com os fonons LO respectivamente.

Figura 3 - Estados $2s$ e $2p_x$ de um exciton pesado em função da espessura do poço. As linhas cheias correspondem ao modelo de barreiras infinitas; as linhas tracejadas (---) correspondem à uma concentração de alumínio de 30% e as linhas traço-ponto(._._.) correspondem à uma concentração de alumínio de 15%. Pode-se observar que a interação exciton-fonon LO remove a degenerescência dos estados $2s$ e $2p_x$ no modelo de barreiras infinitas.

Figura 4 - Estados 2s e 2p_α de um exciton leve em função da espessura do poço. As linhas cheias correspondem ao modelo de barreiras infinitas; as linhas tracejadas (---) correspondem à uma concentração de alumínio de 30% e as linhas traço-ponto correspondem à uma concentração de alumínio de 15%.

Figura 5 - Diferença entre a energia de ligação dos estados 1s e 2s para um exciton pesado em função da espessura do poço para as concentrações de alumínio $x=0,30$ e $x=0,15$, também é mostrado o resultado do modelo de barreiras infinitas. As linhas cheias são os resultados considerando a interação exciton-fonon LO e as linhas tracejadas não a consideram.

Figura 6 - Diferença entre a energia de ligação dos estados 1s e 2s para um exciton leve em função da espessura do poço para as concentrações de alumínio $x=0,30$ e $x=0,15$, também é mostrado o resultado do modelo de barreiras infinitas. As linhas cheias são os resultados considerando a interação exciton-fonon LO e as linhas tracejadas não a consideram.

Figura 7 - Energia de ligação, estado $1s$, de um exciton pesado (---) e de um exciton leve (....) em função da concentração x de alumínio, para um poço de $50 \text{ \AA}$ de espessura.

Figura 8 - Energia de ligação, estados $2s$ e $2p_x$, de um exciton pesado e um exciton leve em função da concentração x de alumínio, para um poço de $50 \text{ \AA}$ de espessura. Linhas cheias estado $2p_x$ do exciton leve; linhas tracejadas (---) estado $2p_x$ do exciton pesado; linhas pontilhadas (...) estado $2s$ do exciton leve e linhas traço-ponto(-.-) estado $2s$ do exciton pesado. Para cada tipo de linha temos uma linha superior que considera os efeitos da interação exciton-fonon LO e uma inferior que os despreza.

Figura 9 - Correção na massa efetiva total paralela às interfaces devido à interação com os fonons LD para um exciton pesado. Linhas cheias são os resultados do modelo de barreiras infinitas, linhas tracejadas(---) para uma concentração $x=0,30$ de alumínio e as linhas traço-ponto(-.-) para uma concentração $x = 0,15$ de alumínio.

Figura 10 - Correção na massa efetiva total paralela às interfaces devido à interação com os fonons LO para um exciton leve. Linhas cheias são os resultados do modelo de barreiras infinitas, linhas tracejadas(---) para uma concentração $x=0,30$ de alumínio e as linhas traço-ponto(-.-) para uma concentração $x = 0,30$ de alumínio.

CAPÍTULO III

EXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS DE GaAs

Os sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade que existem próximos à interface de junções semicondutoras têm recebido uma grande atenção tanto teórica como experimentalmente nas últimas duas décadas. Com o presente desenvolvimento na tecnologia dos semicondutores tem sido possível confinar elétrons e buracos em camadas extremamente finas de semicondutores os quais apresentam intrigantes fenômenos que nunca foram observados em sistemas tridimensionais. Muito recentemente, vários grupos experimentais produziram⁽²¹⁻²⁵⁾, usando várias técnicas diferentes, um sistema eletrônico quase-unidimensional em MOSFET de silício. Seguindo a sugestão de Sakaki,⁽²⁶⁾ Petroff⁽²⁷⁾ e colaboradores fabricaram e estudaram algumas propriedades ópticas de fios quânticos de GaAs. Eles observaram transições envolvendo estados excitônicos, nas quais a largura de linha de emissão eram duas a três vezes maiores que as mesmas linhas observadas em poços quânticos e a energia de ligação encontrada também superava de 6 à 10 meV às obtidas nos poços quânticos. Mais recentemente vários autores têm calculado a mobilidade eletrônica⁽²⁸⁾ e a energia de ligação de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica localizada no interior do fio.⁽²⁹⁻³⁰⁾ Entretanto até agora não foi calculada a energia de

ligação de excitons neste sistema.

Neste capítulo calculamos a energia de ligação dos excitons existentes neste sistema e incluímos também a contribuição do acoplamento exciton-fonon óptico longitudinal (LO) na energia de ligação e mostramos que este efeito é muito importante. Devido a descontinuidade das bandas de energia na interface entre os dois semicondutores a degenerescência entre as bandas de valência do GaAs é removida tal que possamos tratá-las como isoladas e com isso teremos dois sistemas de excitons: um exciton pesado devido ao buraco pesado e um exciton leve devido ao buraco leve. Evidentemente isto é uma aproximação na qual considera-se a Hamiltoniana dos buracos diagonal e despreza-se os efeitos de não-parabolicidade das bandas. A energia de ligação é obtida através de um método variacional e é consideravelmente maior que a energia de ligação em um poço quântico. Usaremos a aproximação de massa efetiva negligenciando os efeitos de não-parabolicidade da banda de condução e retendo somente os termos diagonais da Hamiltoniana de Luttinger e Kohn, ⁽¹³⁾ isto significa que os excitons pesados e os excitons leves são desacoplados e que para cada tipo de exciton precisamos resolver a Hamiltoniana escalar

$$H = E_G + \frac{p_{xe}^2 + p_{ye}^2}{2m_e} + \frac{p_{xh}^2 + p_{yh}^2}{2m_h} + \frac{p_z^2}{2M_\pm} + \frac{p_z^2}{2\mu_\pm} - \frac{e^2}{\epsilon_\infty [(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + z^2]^{1/2}} + V(x, y) \\ + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_0 a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} [\Gamma_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{Z}} (e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_e} e^{i\beta_h \mathbf{q} \cdot \mathbf{z}} - e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_h} e^{-i\beta_e \mathbf{q} \cdot \mathbf{z}}) a_{\mathbf{q}}^\dagger + \text{H.c.}] , \quad (1)$$

onde E_g é a diferença de energia entre a banda de condução e a banda de valência do GaAs, m_e e m_h são as massas de banda do elétron e do buraco respectivamente, $\vec{R}_i = (x_i, y_i)$ e $\vec{p}_i = (p_{xi}, p_{yi})$, $i = e, h$ são as projeções das coordenadas e dos momentos do elétron e do buraco no plano x-y, Z, P_z são as coordenadas e o momentum do centro de massa, z é a coordenada relativa elétron-buraco e p_z o momentum relativo, $M_{\pm} = m_{\pm} + m_e$ é a massa total na direção z e $\mu_{\pm}$ é a massa reduzida do exciton, os sinais (+) significam buracos pesados e os sinais (-) buracos leves. $V(x,y)$ é o poço de potencial confinante para o elétron e para o buraco e será usado, por simplicidade, o modelo de barreiras infinitas, ou seja

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| < L_x/2 \text{ e } |y| < L_y/2 \\ +\infty & \text{se } |x| > L_x/2 \text{ ou } |y| > L_y/2 \end{cases} \quad (2)$$

$a_{\vec{q}}^+$ ($a_{\vec{q}}$) é o operador de criação de um fonon longitudinal óptico de vetor de onda $\vec{q} = (\vec{Q}, q_z)$ e frequência ω_0 . $\Gamma_{\vec{q}}$ é o coeficiente de Fourier da interação elétron e buraco-fonon e é dado por

$$\Gamma_{\vec{q}} = -\frac{i\hbar\omega_0}{q} \left[\frac{2\pi}{\Omega} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{\hbar\omega_0} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

Ω é o volume do sistema e $\beta_e = m_e / M_{\pm}$, $\beta_h = m_{h\pm} / M_{\pm}$.

Para calcularmos a energia de ligação dos excitons leves e pesados, primeiramente eliminamos a coordenada Z do centro de massa da Hamiltoniana H utilizando para isto uma transformação canônica

$$U_1 = \exp \left[-i \sum_{\vec{q}} q_z \cdot Z \hat{a}_{\vec{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{q}} \right]. \quad (4)$$

A energia de ligação do exciton formado entre um eletrôn ocupando o estado fundamental da subbanda existente na banda de condução e um buraco pesado ou leve ocupando também o estado fundamental da subbanda existente na banda de valência será obtida escolhendo uma função de onda variacional a qual é dada por

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{4}{L_x L_y} \cos\left(\frac{\tilde{n} x_e}{L_x}\right) \cos\left(\frac{\tilde{n} x_h}{L_x}\right) \cos\left(\frac{\tilde{m} y_e}{L_y}\right) \cos\left(\frac{\tilde{m} y_h}{L_y}\right) \phi(z) U_2 |0\rangle, \quad (5)$$

onde $\phi(z)$ é uma função de onda variacional dependendo da coordenada relativa entre o eletrôn e o buraco e será escolhida como

$$\phi(z) = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \exp(-\lambda |z|/2) \quad (6)$$

U_2 é uma transformação a qual desloca as coordenadas dos fonons e é dada por

$$U_2 = \exp\left[\sum_{\vec{q}} (f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} - f_{\vec{q}} a_{\vec{q}})\right], \quad (7)$$

$|0\rangle$ é o estado sem nenhum fonon. O parâmetro variacional λ e a função $f_{\vec{q}}$ são determinados minimizando o valor esperado da Hamiltoniana, isto é,

$$E = \langle \psi | U_1^{-1} H U_1 | \psi \rangle. \quad (8)$$

A energia do exciton pode ser expressa na seguinte forma

$$E = E_G + E_{cin} + E_{Coul} + E_{pol}, \quad (9)$$

onde E_G é a diferença entre a energia da banda de condução e energia da banda de valência, E_{cin} é a energia cinética, E_{Coul} é a energia devido à interação coulômbica a qual é dada por

$$E_{Coul} = -\frac{2\lambda^2 e^2}{\pi \epsilon_{\infty}} \int dQ \frac{F(Q)}{\lambda^2 + Q^2}, \quad (10)$$

E_{pol} é a contribuição polarônica à energia de ligação e é dada por

$$E_{pol} = -\frac{e^2 \hbar \omega_0}{\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int dQ \frac{F(Q)}{\hbar \omega_0 + \hbar^2 Q^2 / 2M_{\pm}} \left(\frac{1}{1 + (\beta_h Q / \lambda)^2} - \frac{1}{1 + (\beta_e Q / \lambda)^2} \right)^2 \quad (11)$$

onde $F(Q)$ é o fator de forma para o sistema quase-unidimensional o qual é dado por

$$F(Q) = \int dK \frac{G(K)H(Q,K)}{\sqrt{K^2 + Q^2}}, \quad (12)$$

onde

$$G(K) = \left(\frac{2}{L_x K}\right)^2 \frac{\sin^2\left(\frac{L_x K}{2}\right)}{\left[1 - \left(\frac{L_x K}{2\pi}\right)^2\right]^2} \quad (13)$$

$$H(Q,K) = 2 \frac{(u^2 + 8\pi^2)}{(u^2 + 4\pi^2)^2} (1 - e^{-u}) + \frac{u}{u^2 + 4\pi^2} + \frac{2}{u} \left[1 - \frac{1}{u} (1 - e^{-u})\right], \quad (14)$$

onde $u = L_y \sqrt{Q^2 + K^2}$.

É interessante evidenciar que este resultado para a energia, equação (9), representa a interação de um elétron com um buraco dentro de um fio quântico através do potencial de Coulomb o qual é blindado pela constante dielétrica óptica (ϵ_{∞}), enquanto cada um deles interagem com os fonons longitudinais ópticos do GaAs. Neste sentido, este resultado é uma generalização do polaron ligado à uma impureza. No limite $m_h \rightarrow \infty$, isto é, $\beta_e \rightarrow 0$ e $\beta_h \rightarrow 1$ obtemos os a energia do polaron ligado à uma impureza hidrogênica doadora. Neste limite, o efeito da transformação canônica é eliminar a coordenada do elétron da Hamiltoniana H e trocar a blindagem no termo de Coulomb de ϵ_{∞} para ϵ_0 . A minimização da energia dada pela equação (9) com respeito ao parâmetro variacional λ nos fornece a energia do estado fundamental do exciton. Então, a energia de ligação do exciton é obtida fazendo

a diferença entre a energia do estado fundamental total entre o elétron e o buraco e o valor minimizado de E . Estes cálculos, evidentemente, são executados numericamente considerando-se a interação exciton-fonon e depois negligenciando-a para vários valores dos lados L_x e L_y do fio. Os resultados da energia de ligação do exciton pesado e do exciton leve estão mostradas nas figuras 1 e 2, respectivamente, em função do lado L_x para vários valores do lado L_y . Como pode ser observado das figuras, as energias de ligações dos excitons diminuem monotonicamente quando um dos lados (L_x) aumenta e o outro (L_y) permanece fixo. No limite em que $L_x \rightarrow \infty$ o sistema aproxima-se de um poço quântico e a energia de ligação tende ao resultado quase-bidimensional. É interessante notarmos que a energia de ligação dos excitons são correlacionadas com a área da secção transversal, isto é, fios com mesma área transversal têm aproximadamente a mesma energia de ligação. Este resultado está em acordo com os resultados obtidos por Bryant no caso dos estados ligados de uma impureza hidrogênica doadora no interior de um fio quântico de GaAs.

Das figuras 1 e 2 podemos notar que os valores das energias de ligações dos excitons pesados e excitons leves são maiores que os valores das energias de ligações dos excitons em poços quânticos. Estes resultados são consistentes com os valores observados por Petroff e colaboradores. Eles observaram que a energia de ligação atribuída aos estados excitônicos eram de 8-10 meV maiores que as correspondentes energias nos poços quânticos.

A energia de ligação do exciton pesado é maior que a energia de ligação do exciton leve, em contraste com os resultados bidimensionais. A razão para este comportamento é facilmente entendida uma vez que a massa reduzida do exciton pesado é maior que a massa reduzida do exciton leve e como o rydberg efetivo depende linearmente da massa reduzida este aumento na energia de ligação era esperado.

Nas figuras 1 e 2 incluímos as contribuições devido à interação entre o exciton pesado e o exciton leve com os fonons longitudinais ópticos respectivamente. O deslocamento relativo na energia de ligação do exciton, isto é, $\Delta E_B = (E_B^* - E_B)/E_B$, onde E_B^* e E_B são as energias de ligações com e sem a interação exciton-fonons LO respectivamente, diminuem com o aumento de um dos lados do fio. A contribuição polarônica é maior para fios com dimensões menores, ΔE_B varia de 23% para um fio com dimensões $10 \text{ \AA} \times 50 \text{ \AA}$, para o exciton pesado até 19% para um fio com dimensões $200 \text{ \AA} \times 200 \text{ \AA}$ para o exciton leve.

A importância da interação exciton-fonon LO é mais pronunciada quando a energia de ligação do exciton é maior. Então, para uma dada dimensão de um fio, a maior contribuição polarônica para a energia de ligação do exciton será no exciton pesado o qual é mais fortemente ligado.

Em conclusão, calculamos a energia de ligação para excitons leves e pesados em fios quânticos de GaAs com secção transversal retangular em função dos lados L_x e L_y do fio. Os resultados

que obtivemos mostram que a energia de ligação aumenta quando os lados do fio diminuem. A energia de ligação aproxima-se do valor esperado para o sistema bidimensional quando um dos lados é muito grande. Outro resultado interessante é que a energia de ligação é correlacionada com a área da secção transversal, ou seja, fios com áreas iguais têm energia de ligação aproximadamente iguais.

Nossos resultados mostram explicitamente a importância quantitativa da contribuição polarônica no aumento substancial da energia de ligação dos excitons em sistemas quase-unidimensionais.

Figura 1 - Energia de ligação de um exciton pesado em função do lado L_x para os valores de $L_y = 50, 100, 150$ e $200 \text{ \AA}$. As linhas cheias são os resultados considerando a interação exciton-fonon LO e as linhas tracejadas são os resultados desprezando-a.

Figura 2 - Energia de ligação de um exciton leve em função do lado L_y para os valores de $L_y = 50, 100, 150$ e $200 \text{ \AA}$. As linhas cheias são os resultados considerando a interação exciton-fonon LO e as linhas tracejadas são os resultados desprezando-a.

CAPÍTULO IV

INTERAÇÃO ELETRON-FONON EM FIOS QUÂNTICOS DE GaAs

Com recentes avanços na tecnologia de crescimento de semicondutores tem sido possível fabricar fios extremamente finos ($200 \text{ \AA} \times 200 \text{ \AA}$) e por causa destas dimensões são conhecidos como fios quânticos. Nestes sistemas quase-unidimensionais, o movimento eletrônico ocorre na direção de crescimento do fio e é quantizado nas outras duas dimensões. Existem vários trabalhos teóricos visando o entendimento das propriedades destes novos sistemas. Cálculos da mobilidade dos elétrons, da energia de ligação em impurezas hidrogênicas e a formação de excitons têm sido realizados. Entretanto um efeito importante destas estruturas semicondutoras quase-unidimensionais que não foi investigado nem teórica nem experimentalmente é a correção polarônica na energia e na massa efetiva dos elétrons. Neste capítulo, pretendemos calcular as correções polarônicas na energia e na massa efetiva de elétrons confinados em fios de GaAs embebidos em $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Usando teoria de perturbação de segunda ordem calculamos as correções polarônicas em função das dimensões laterais do fio. Como até o momento não existe nenhum cálculo da estrutura de fonons para esse sistema, usaremos como

aproximação, os fonons LO do volume em vez dos fonons confinados, isto é, consideramos os eletrons confinados em um poço de potencial bidimensional e interagindo com os modos LO do volume do material relevante (GaAs) através da Hamiltoniana de Fröhlich. Nos cálculos à seguir, desprezaremos qualquer correção na massa de banda dos eletrons devido à não parabolicidade da banda de condução e mostramos que ocorre um aumento nas correções polarônicas quando comparadas com o caso tridimensional. Este resultado que contrasta com o resultado bidimensional, mostra explicitamente que o efeito da dimensionalidade é importante.

Na aproximação de massa efetiva, um eletron interagindo com os fonons LO do GaAs em um fio quântico é descrito pela Hamiltoniana de Fröhlich, a qual é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + V(y,z) + \sum_{\vec{q}} \left(n_{\vec{q}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} e^{iq_x x} a_{\vec{q}} + h.c. \right) \quad (1)$$

onde $\vec{p}$ é o momentum do eletron, m é a massa de banda, $\vec{R}=(y,z)$ é a projeção da coordenada do eletron no plano, $a_{\vec{q}}^{\dagger}$ ($a_{\vec{q}}$) é o operador de criação (destruição) de um fonon longitudinal óptico de vetor de onda $\vec{q}=(q_x, \vec{Q})$ e frequência ω_{LO} . $V(y,z)$ é o potencial bidimensional confinante, o qual por motivo de simplicidade, será escolhido

$$V(y,z) = \begin{cases} 0 & \text{se } |y| < L_y/2 \text{ e } |z| < L_z/2 \\ +\infty & \text{se } |y| > L_y/2 \text{ ou } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2)$$

e $\Gamma_{\vec{q}}$ é o coeficiente de Fourier da interação elétron-fonon LO o qual é dada por

$$\Gamma_{\vec{q}} = \frac{i\hbar\omega_{LO}}{q} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/4} \left(\frac{4\pi\alpha}{\Omega} \right)^{1/2} \quad (3)$$

onde α é a constante de acoplamento de Fröhlich usual, para o GaAs $\alpha = 0,07$.

Para calcularmos a energia e a massa efetiva do polaron quase-unidimensional usaremos as transformações canônicas de Lee, Low e Pines para remover a coordenada x do elétron e deslocar as coordenadas dos fonons. A primeira transformação é

$$S = \exp \left(-i \sum_{\vec{q}} x \cdot q_x a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} \right) \quad (4)$$

e a segunda

$$U = \exp \left[\sum_{\vec{q}} \left(f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} - f_{\vec{q}}^* a_{\vec{q}} \right) \right] \quad (5)$$

onde $f_{\vec{q}}$ são funções variacionais obtidas minimizando a energia do estado fundamental. O valor esperado da Hamiltoniana transformada, $\mathcal{H} = \bar{U}^{\dagger} S^{\dagger} H S U$, é calculada escolhendo para o estado fundamental uma função de onda constituída pelo produto da função eletrônica e o vácuo dos fonons,

$$|\psi\rangle = \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) e^{i q_x x} |0\rangle \quad (6)$$

com $n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$ e $\phi_{n_y}(y)$ e $\phi_{n_z}(z)$ são as funções de onda para o movimento nas direções y e z respectivamente, em um poço de potencial unidimensional com barreiras infinitas.

As correções polarônicas na energia e na massa efetiva para um elétron no nível $n = (n_y, n_z)$ são, usando teoria de perturbação de segunda ordem dadas por

$$\Delta E_{(n_y, n_z)} = \frac{-2\alpha\hbar\omega_{LO}}{\pi} \sum_{m_y, m_z} \int dQ \frac{F_{n_y n_z m_y m_z}(Q)}{\left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (m_y^2 - n_y^2) + \left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2 (m_z^2 - n_z^2) + Q^2 + 1} \quad (7)$$

e

$$\Delta M_{(n_y, n_z)} = \frac{8\alpha m}{\pi} \sum_{m_y, m_z} \int dQ \frac{Q^2 F_{n_y n_z m_y m_z}(Q)}{\left[\left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (m_y^2 - n_y^2) + \left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2 (m_z^2 - n_z^2) + Q^2 + 1\right]^3} \quad (8)$$

onde $F(Q)$ é o fator de forma para o sistema quase-unidimensional o qual é dado por

$$F_{n_y n_z m_y m_z}(Q) = \int d\zeta \frac{G_{n_y m_y}^2(\zeta) H_{n_z m_z}(Q, \zeta)}{(\zeta^2 + Q^2)^{1/2}}, \quad (9)$$

onde

$$G_{n_y m_y}(\zeta) = \int d\eta \phi_{n_y}^*(\eta) \phi_{m_y}(\eta) e^{i\zeta\eta} \quad (10)$$

e

$$H_{n_z m_z}(Q, \zeta) = \int d\eta \, d\eta' \, \phi_{n_z}^*(\eta) \, \phi_{m_z}(\eta) \, \phi_{n_z}^*(\eta') \, \phi_{m_z}(\eta') \\ \times \exp(-\sqrt{Q^2 + \zeta^2} |\eta - \eta'|) \quad . \quad (11)$$

Evidentemente as expressões (7) e (8) são calculadas numericamente e para o nível $n = 1$ ($n_y = 1$ e $n_z = 1$) mostramos nas figuras (1) e (2) os resultados para a correção da energia e o aumento da massa efetiva em função dos lados L_y e L_z do fio. Para facilitar a comparação, os resultados tridimensionais ($E = -\alpha \hbar \omega_0$ e $\Delta M = \frac{\alpha}{6} M$) são também mostrados. Como podemos observar nas figuras as correções tanto da energia como da massa efetiva podem ser maiores ou menores que o correspondente sistema bidimensional dependendo da escolha de L_y e L_z do fio. Se fizermos um dos lados do fio igual à zero enquanto o outro tende para o infinito obtemos o resultado bidimensional e quando os dois lados são grandes o resultado para o sistema tridimensional é então recuperado. Entretanto quando L_y e L_z são pequenos tais que a área da seção transversal do fio é menor que $100 \times 100 \text{ \AA}$ a correção na massa efetiva é superior ao valor da massa para o sistema bidimensional correspondente. Na heterojunção de GaAs-Al_xGa_{1-x}As os mecanismos utilizados para reduzir a interação eletrón-fonon LO em relação ao sistema tridimensional correspondente são os efeitos da quase-bidimensionalidade, ou seja, da função de onda da subbanda e os efeitos de muitos corpos que blindam esta interação deixando-a mais fraca. Neste sistema, em contraste ao sistema bidimensional, os efeitos de blindagem não são

importantes pois a frequência de plasma é muito baixa ($\omega_p(q) = 5$ meV com $n_e \sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ e $q = 1/R_p$, onde R_p é o raio do polaron) quando comparada com a frequência dos fonons LO ($\hbar\omega_{LO} = 37 \text{ meV}$), assim sendo os eletrons não podem oscilar tão rapidamente como os fonons e portanto não conseguem blindar os campos coulômbicos de longo alcance dos fonons. ⁽³⁴⁾

Em conclusão, a interação eletrôn-fonon em fios quânticos, dependendo dos tamanhos de L_y e L_z , é maior que no sistema estritamente bidimensional e sempre maior que no sistema tridimensional.

Neste capítulo, estudamos a interação entre um eletrôn e os fonons LO de volume em um fio quântico de GaAs. Mostramos que tanto a energia como a massa efetiva têm correções que são sempre maiores que no sistema tridimensional e dependendo dos valores de L_y e L_z estas correções são maiores também que as correções na sistema estritamente bidimensional. Mostramos também que os efeitos de blindagem não devem ser importantes neste sistema por que a frequência de plasma dos eletrons é muito menor que a frequência dos fonons LO.

Fig. 1

Figura 1 - Energia polarônica em fios quânticos de GaAs em função do lado L_z para vários valores de L_y . 2D é o resultado para o sistema estritamente bidimensional e 3D para o sistema tridimensional.

Fig. 2

Figura 2 - Correção na massa efetiva do polaron em fios quânticos de GaAs em função do lado L_z para vários valores de L_y . 2D é o resultado para o sistema estritamente bidimensional e 3D para o sistema tridimensional.

CAPÍTULO V

INTERAÇÃO ELETRON-FONON INTERFACIAL

Com a evolução de novas técnicas de crescimento de cristais tais como MBE (Molecular Beam Epitaxy) e MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) tem sido possível criar uma série de novos sistemas semicondutores tais como heterojunções, poços quânticos e super-redes os quais apresentam novos fenômenos físicos interessantes. Estas estruturas semicondutoras são em geral, constituídas de elementos dos grupos II-VI ou III-V e têm em comum a presença de uma ou mais interfaces, as quais são responsáveis pelo aparecimento de novos efeitos e pela mudança nas propriedades de volume (bulk).

Como estes sistemas são constituídos por semicondutores fracamente polares as propriedades eletrônicas são alteradas devido à interação eletrôn-fonon. Devido à presença das interfaces, os eletrons podem acoplar com os fônons longitudinais ópticos e com os fônons interfaciais. Neste capítulo estudamos a interação eletrôn-fonon óptico volumétrico, superficial e interfacial, obtemos os modos de polarização para estes fônons, a relação de dispersão e o operador que descreve a

interação entre um eletrón e os vários tipos de fonons ópticos presentes nestes sistemas. Com os potenciais de interação eletrón-fonons calculados, poderemos obter a correção polarônica na energia do estado fundamental e na massa efetiva dos eletrons.

AUTO-MODOS DE POLARIZAÇÃO

Consideraremos cristais iônicos diatômicos ou semicondutores polares consistindo de um par de íons positivos e negativos por cela de Wigner-Seitz e como nosso interesse é voltado para os modos ópticos de longo comprimento de onda usaremos o modelo na aproximação do contínuo. Neste caso podemos escrever o deslocamento dos íons positivos e negativos como $\vec{U}_+(\vec{r}, t)$ e $\vec{U}_-(\vec{r}, t)$, respectivamente e obter as equações de movimento para os deslocamentos dos íons no n-ésimo material, as quais são dadas por

$$m_{n+} \ddot{\vec{U}}_+(\vec{r}, t) = -f_n (\ddot{\vec{U}}_+(\vec{r}, t) - \ddot{\vec{U}}_-(\vec{r}, t)) + e_n^* \vec{E}_+^{\text{loc}}(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$$m_{n-} \ddot{\vec{U}}_-(\vec{r}, t) = f_n (\ddot{\vec{U}}_+(\vec{r}, t) - \ddot{\vec{U}}_-(\vec{r}, t)) - e_n^* \vec{E}_-^{\text{loc}}(\vec{r}, t) \quad (2)$$

Onde m_{n+} e m_{n-} são as massas dos íons positivo e negativo respectivamente, dentro da cela de Wigner-Seitz do n-ésimo

material, e_n^* é a carga efetiva dos íons, f_n é a constante de força de curto alcance entre íons, $\vec{E}_+^{loc}$ e $\vec{E}_-^{loc}$ são os campos locais nas posições dos íons e são responsáveis pelas forças de longo alcance. Em cada material a constante f_n será considerada a mesma tanto no volume (bulk) como nas superfícies.

Se considerarmos o deslocamento relativo entre os íons podemos reescrever as equações (1) e (2) na forma

$$\mu_n \ddot{\vec{U}}(\vec{r}, t) = -\mu_n \omega_{on}^2 \vec{U}(\vec{r}, t) + e_n^* \vec{E}^{loc}(\vec{r}, t) \quad (3)$$

onde μ_n é a massa reduzida dos íons, ω_{on} é a frequência associada com a parte de curto alcance da interação. A oscilação dos íons produz um campo de polarização o qual consiste de duas partes: (i) a polarização iônica causada pela separação relativa dos íons positivo e negativo e (ii) a polarização eletrônica causada pelo campo elétrico local associado com os modos ópticos agindo nos eletrons dos íons. A polarização $\vec{P}(\vec{r}, t)$ é dada como a soma destas duas contribuições,

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = n_n e_n^* \vec{U}(\vec{r}, t) + n_n \alpha_n \vec{E}^{loc}(\vec{r}, t) \quad (4)$$

onde n_n é o número de células de Wigner-Seitz por unidade de volume e α_n é a polarizabilidade eletrônica por cela de Wigner-Seitz na camada de material n.

A equação de Poisson para o potencial escalar $V(\vec{r}, t)$ é dada

por

$$\nabla^2 V(\vec{r}, t) = -4\pi \rho^{\text{tot}}(\vec{r}, t), \quad (5)$$

onde ρ^{tot} é a densidade de carga total. Assumindo que os meios são não condutores, não magnéticos e não carregados ρ^{tot} será a soma da densidade de carga devido a polarização da superfície e do volume, assim

$$V(\vec{r}, t) = - \sum_{\beta} \int d\vec{r}^* \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}^*|} P_{\beta}(\vec{r}^*, t), \quad (6)$$

usando que

$$E_{\alpha}(\vec{r}, t) = - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} V(\vec{r}, t) \quad (7)$$

e a bem conhecida relação de Lorentz entre o campo local e o campo elétrico macroscópico $\vec{E}$,

$$\vec{E}_{+}^{\text{loc}}(\vec{r}, t) = \vec{E}_{-}^{\text{loc}}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{4\pi}{3} \vec{P}(\vec{r}, t), \quad (8)$$

a equação (5) pode ser reescrita na forma

$$E_{\alpha}^{\text{loc}}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi}{3} P_{\alpha}(\vec{r}, t) + 4\pi \sum_{\beta} \int d\vec{r}^* \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}^*) P_{\beta}(\vec{r}^*, t), \quad (9)$$

onde

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}, \quad (10)$$

é o tensor de Green.

Usando as equações (3), (4) e (9) pode-se escrever a equação de movimento para a polarização,

$$\begin{aligned} \ddot{P}_\alpha(\vec{r}, t) = & \alpha_n n_n \left[\frac{4\pi}{3} \ddot{P}_\alpha(\vec{r}, t) + 4\pi \sum_\beta \int d\vec{r}' \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}') \ddot{P}_\beta(\vec{r}', t) \right] \\ & - n_n e_n^* \omega_{0n}^2 \left\{ \frac{1}{n_n e_n^*} P_\alpha(\vec{r}, t) - 4\pi \frac{\alpha_n}{e_n^*} \left[\frac{1}{3} P_\alpha(\vec{r}, t) + \right. \right. \\ & \left. \sum_\beta \int d\vec{r}' \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}') P_\beta(\vec{r}', t) \right] \left. \right\} + 4\pi \frac{n_n e_n^{*2}}{\mu_n} \left[\frac{1}{3} P_\alpha(\vec{r}, t) \right. \\ & \left. + \sum_\beta \int d\vec{r}' \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}') P_\beta(\vec{r}', t) \right]. \quad (11) \end{aligned}$$

A dependência temporal da polarização é considerada harmônica,

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \vec{P}(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \quad (12)$$

assim sendo, a equação (11) pode ser reescrita na forma

$$\frac{(\lambda_n - \lambda_{0n})(1 - 4\pi/3 n_n \alpha_n) + 4\pi/3}{1 - n_n \alpha_n (\lambda_n - \lambda_{0n})} P_\alpha(\vec{r}) = -4\pi \sum_\beta \int d\vec{r}' \Gamma_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}') P_\beta(\vec{r}') \quad (13)$$

onde $\lambda_{on} = \frac{4\pi\omega_{on}^2}{\omega_{pn}^2}$, $\lambda_n = \frac{4\pi\omega^2}{\omega_{pn}^2}$ e $\omega_{pn}^2 = \frac{4\pi n_n e_n^{*2}}{\mu_n}$ é a

frequência de plasma dos íons.

Como estamos interessados em propagação de ondas nas interfaces as quais são paralelas ao plano x-y, usaremos o fato de existir invariância translacional nesta direção introduzindo a transformada de Fourier bidimensional para a polarização,

$$\vec{P}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{Q} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \vec{P}(\vec{Q};z) , \quad (14)$$

onde $\vec{r} = (\vec{R}, z)$ e $\vec{Q} = (\vec{Q}, q_z)$. Como $\vec{P}(\vec{r})$ é real sua transformada de Fourier deve satisfazer a seguinte condição

$$\vec{P}(\vec{Q};z) = \vec{P}^*(-\vec{Q};z) . \quad (15)$$

A equação integral (13) pode ser escrita numa forma mais compacta

$$\sum_{\beta} \delta_{\alpha\beta} P_{\beta}(\vec{Q};z) = \sum_{\beta} \int dz'' M_{\alpha\beta}(z-z'') \cdot P_{\beta}(\vec{Q};z'') , \quad (16)$$

$$\text{com } \delta_{\alpha\beta} = - \frac{(\lambda_n - \lambda_{on})(\delta_{\alpha\beta} - \Lambda_{\alpha\beta} n_n \alpha_n) + \Lambda_{\alpha\beta}}{1 - n_n \alpha_n (\lambda_n - \lambda_{on})} , \quad (17)$$

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 4\gamma/3 & 0 & 0 \\ 0 & 4\gamma/3 & 0 \\ 0 & 0 & -8\gamma/3 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$M_{\alpha\beta}(z - z'') = \begin{pmatrix} -Q_x^2 & -Q_x Q_y & -iQ_x Q \operatorname{sgn}(z - z'') \\ -Q Q & -Q_y^2 & -iQ_y Q \operatorname{sgn}(z - z'') \\ -iQ_x Q \operatorname{sgn}(z - z'') & -iQ_y Q \operatorname{sgn}(z - z'') & Q^2 \end{pmatrix}$$

$$\frac{2\gamma e^{-Q|z-z''|}}{Q}, \quad (19)$$

$$\text{onde } \operatorname{sgn}(z - z'') = \begin{cases} 1 & \text{se } z > z'' \\ -1 & \text{se } z < z'' \end{cases}. \quad (20)$$

A equação (16) com $\chi_{\alpha\beta}$ dada por (17) é a forma microscópica da equação integral para a polarização. Esta equação também pode ser obtida na forma macroscópica partindo da equação (6) e usando a relação macroscópica linear entre a polarização $\vec{P}(\vec{Q}; z)$ e o campo elétrico $\vec{E}(\vec{Q}; z)$

$$\vec{P}(\vec{Q}; z) = \frac{\chi_n(\omega)}{4\gamma} \cdot \vec{E}(\vec{Q}; z), \quad (21)$$

onde $\chi_n(\omega) = \epsilon_n(\omega) - 1$ é a suscetibilidade dielétrica isotrópica. Usando os mesmos procedimentos já descritos obtemos (16) com

$$\epsilon_{\alpha\beta} = 4\pi \begin{pmatrix} \chi_n^{-1}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \chi_n^{-1}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_n(\omega) \chi_n^{-1}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Da equação (16) obtemos os auto-valores $\omega_i(\vec{Q})$ correspondendo aos auto-modos de polarização $\vec{P}^i(\vec{Q}; z)$. Para obtermos a relação de ortogonalidade e a normalização dos modos de polarização $\vec{P}^i(\vec{Q}; z)$ usamos ambas as formas da equação integral (16): a microscópica (17) e (18) e a macroscópica (22). Os modos de polarização $\vec{P}^i(\vec{Q}; z)$ satisfazem as relações

$$\sum_{\alpha} \int dz [\chi_n^{-1}(\omega_i) - \chi_n^{-1}(\omega_j)] P_{\alpha}^{j*}(\vec{Q}; z) \cdot P_{\alpha}^i(\vec{Q}; z) = 0 \quad (23)$$

e

$$\sum_{\alpha} \int dz \theta_n^{1/2}(\omega_i) \theta_n^{1/2}(\omega_j) \cdot P_{\alpha}^{j*}(\vec{Q}; z) \cdot P_{\alpha}^i(\vec{Q}; z) = \delta_{ij} \quad (24)$$

$$\text{onde } \theta_n^{1/2}(\omega_i) = \frac{1}{1 + n_n \alpha_n (\lambda_{on} - \lambda_{in})}. \quad (25)$$

A seguir definimos os versores $\vec{e}_Q$ e $\vec{e}_S$ no plano x-y

$$\vec{e}_Q = \frac{\vec{Q}}{Q} = \frac{1}{Q} [Q_x \vec{e}_x + Q_y \vec{e}_y] \quad (26)$$

e

$$\vec{e}_S = \frac{1}{Q} [-Q_y \vec{e}_x + Q_x \vec{e}_y] . \quad (27)$$

Neste novo sistema de coordenadas ($\vec{e}_Q$, $\vec{e}_S$, $\vec{e}_z$) a polarização será

$$\vec{P}(\vec{Q}; z) = P_Q(\vec{Q}; z) \vec{e}_Q + P_S(\vec{Q}; z) \vec{e}_S + P_z(\vec{Q}; z) \vec{e}_z , \quad (28)$$

$$\text{com } P_Q(\vec{Q}; z) = \frac{1}{Q} [Q_x P_x(\vec{Q}; z) + Q_y P_y(\vec{Q}; z)] \quad (29)$$

e

$$P_S(\vec{Q}; z) = \frac{1}{Q} [Q_x P_y(\vec{Q}; z) - Q_y P_x(\vec{Q}; z)] . \quad (30)$$

Este sistema de coordenadas é conveniente porque o campo de polarização pode ser facilmente separado em uma parte S-polarizada ($\vec{P} = (0, P_S, 0)$) e uma parte P-polarizada ($\vec{P} = (P_Q, 0, P_z)$) e uma relação analítica, completamente desacoplada, para cada uma das partes da polarização pode ser obtida. Para a polarização S obtemos

$$\chi_n^{-1}(\omega) \cdot P_S(\vec{Q}; z) = 0. \quad (31)$$

As outras duas componentes P-polarizadas, $P_{\vec{Q}}$ e P_z , formam um sistema acoplado de equações integrais de Fredholm

$$\chi_n^{-1}(\omega) \cdot P_{\vec{Q}}(\vec{Q}; z) = \frac{1}{2} \int dz'' e^{-Q|z-z''|} [-Q \cdot P_{\vec{Q}}(\vec{Q}; z'') - iQ \cdot \text{sgn}(z-z'') \cdot P_z(\vec{Q}; z'')], \quad (32)$$

$$\chi_n^{-1}(\omega) \cdot \epsilon_n(\omega) \cdot P_z(\vec{Q}; z) = \frac{1}{2} \int dz'' e^{-Q|z-z''|} [-i \cdot \text{sgn}(z-z'') \cdot P_{\vec{Q}}(\vec{Q}; z'') + Q \cdot P_z(\vec{Q}; z'')]. \quad (33)$$

A maneira usual de resolver este sistema de equações integrais é transformá-lo em um sistema de equações diferenciais. As equações (32) e (33) podem ser expressas na forma

$$\chi_n^{-1}(\omega) \cdot \frac{d}{dz} P_{\vec{Q}}(\vec{Q}; z) = iQ \chi_n^{-1}(\omega) \cdot P_z(\vec{Q}; z), \quad (34)$$

$$\chi_n^{-1}(\omega) \epsilon_n(\omega) \frac{d}{dz} P_z(\vec{Q}; z) = -i.Q \chi_n^{-1}(\omega) \epsilon_n(\omega) P_Q(\vec{Q}; z). \quad (35)$$

As soluções de (34) e (35) formam um conjunto completo para os auto-modos de polarização P-polarizados. Os modos S-polarizados são soluções da equação (31). As soluções não triviais são obtidas fazendo $\chi_n^{-1}(\omega) = 0$, isto ocorre quando $\epsilon_n(\omega) \rightarrow \infty$, ou seja, quando as oscilações são transversais ($\omega = \omega_{Tn}$). Os fonons transversais ópticos (TO) com frequência ω_{Tn} têm um campo elétrico associado identicamente nulo em todo espaço, $E_{Tn}^S = 0$, além disso, estes modos são degenerados e não são acompanhados pelo aparecimento de cargas superficiais nem cargas volumétricas. Como já dissemos os modos P-polarizados são completamente desacoplados dos modos S-polarizados e ambos os sistemas de auto-modos de polarização satisfazem relações fechadas da forma

$$\sum_j \vec{P}_P^j(\vec{Q}; z) \cdot \vec{P}_P^j(\vec{Q}; z'') = \frac{\omega_{on}^2}{\theta_n} \delta(z-z'') \quad (36)$$

onde a soma em j engloba todos os tipos de polarização P-polarizadas e

$$\sum_l \vec{P}_{STn}^{l*}(\vec{Q}; z) \cdot \vec{P}_{STn}^l(\vec{Q}; z'') = \frac{\omega_{pn}^2}{\theta_n} \delta(z-z''), \quad (37)$$

onde a soma em l engloba todos os tipos de polarização S-polarizadas.

HAMILTONIANA DOS AUTO-MODOS DE POLARIZAÇÃO

Nesta seção obtemos a Hamiltoniana para os modos de polarização na forma usual (segunda quantização). Partindo da equação (3) encontramos a seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H}_p = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int d\vec{r} \left\{ \frac{1}{n_n \mu_n} \vec{\pi}_{\alpha} \vec{\pi}_{\alpha} + n_n \mu_n \omega_{on}^2 u_{\alpha} u_{\alpha} - n_n e_n^* u_{\alpha} E_{\alpha}^{loc} \right\}, \quad (38)$$

onde $\vec{\pi} = n_n \mu_n \vec{U}$, é o momento canônico.

Usando a simetria do sistema através da transformada de Fourier bidimensional podemos escrever (36)

$$\mathcal{H}_p = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{\alpha} \int d\vec{Q} \int dz \left\{ \frac{1}{n_n \mu_n} \vec{\pi}_{\alpha}^*(\vec{Q}, z) \vec{\pi}_{\alpha}(\vec{Q}, z) + n_n \mu_n \omega_{on}^2 u_{\alpha}^*(\vec{Q}, z) u_{\alpha}(\vec{Q}, z) - n_n e_n^* u_{\alpha}^*(\vec{Q}, z) E_{\alpha}^{loc}(\vec{Q}, z) \right\} \quad (39)$$

onde os vetores $\vec{\pi}$, $\vec{U}$ e $\vec{E}^{loc}$ são dependentes do tempo. Podemos expressar o campo elétrico local em termos da polarização

$$\vec{E}^{loc}(\vec{Q}; z) = \frac{\lambda_{on} - \lambda_n}{1 + n_n \alpha_n (\lambda_{on} - \lambda_n)} \vec{P}(\vec{Q}; z), \quad (40)$$

e finalmente expressar a polarização em termos do deslocamento $\vec{U}$ através das equações (38) e (4),

$$\vec{U}(\vec{Q}; z) = \frac{\theta_n^{1/2}}{n_n e_n^*} \vec{P}(\vec{Q}; z). \quad (41)$$

Substituindo as expressões (38) e (39) na equação (37) a Hamiltoniana pode ser escrita na forma

$$\mathcal{H}_P = \frac{2\pi}{A} \sum_{\vec{Q}} \sum_{\alpha} \int dz \frac{\theta_n}{\omega_{pn}^2} \left\{ \dot{P}_{\alpha}^* (\vec{Q}; z) \cdot \dot{P}_{\alpha} (\vec{Q}; z) + \omega^2 P_{\alpha}^* (\vec{Q}; z) P_{\alpha} (\vec{Q}; z) \right\}, \quad (42)$$

onde A é a unidade de área do sistema no plano $x-y$. Procedendo na maneira usual, a polarização $\vec{P}(\vec{Q}; z)$ é representada em termos de um conjunto completo de auto-modos de polarização ortonormais $\vec{P}^j_{\alpha}(\vec{Q}; z)$,

$$P_{\alpha}(\vec{Q}; z) = \sum_j \left(\frac{\hbar A}{8\pi \omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} [a_j(\vec{Q}) + a_j^{\dagger}(\vec{Q})] P_{\alpha}^j(\vec{Q}; z) \quad (43)$$

$$\dot{P}_{\alpha}(\vec{Q}; z) = i \sum_j \left(\frac{\hbar A \omega_j(\vec{Q})}{8\pi} \right)^{1/2} [a_j^{\dagger}(-\vec{Q}) - a_j(\vec{Q})] P_{\alpha}^j(\vec{Q}; z). \quad (44)$$

Nas equações (43) e (44) $\vec{P}$ e $\dot{\vec{P}}$ são operadores de campo quântico e suas relações de comutação satisfazem,

$$[\dot{P}_{\alpha}(\vec{Q}; z), P_{\beta}(\vec{Q}'; z'')] = \frac{\hbar}{i} \frac{\omega_{pn}^2 A}{4\pi \theta_n} \delta_{\vec{Q}, -\vec{Q}'} \delta(z-z'') \delta_{\alpha\beta}, \quad (45)$$

$$[\dot{P}_{\alpha}(\vec{Q}; z), \dot{P}_{\beta}(\vec{Q}'; z'')] = [P_{\alpha}(\vec{Q}; z), P_{\beta}(\vec{Q}'; z'')] = 0. \quad (46)$$

Os operadores $a_j^{\dagger}(\vec{Q})$ e $a_j(\vec{Q})$ são os operadores de criação e aniquilação de um fonon óptico de momentum $\hbar \vec{Q}$ e energia $\hbar \omega_j(\vec{Q})$,

respectivamente, e satisfazem as conhecidas relações de comutação,

$$[a_j(\vec{Q}), a_i^\dagger(\vec{Q})] = \delta_{\vec{Q}, \vec{Q}'} \delta_{ij} , \quad (47)$$

$$[a_j(\vec{Q}), a_j(\vec{Q})] = [a_j^\dagger(\vec{Q}), a_i^\dagger(\vec{Q})] = 0 .$$

Usando as relações (45) e (46) juntamente com a relação de ortonormalização (24), obtemos a Hamiltoniana dos auto-modos de polarização na forma diagonalizada usual

$$H_P = H_P^P + H_P^S , \quad (48)$$

$$H_P^P = \sum_j \sum_{\vec{Q}} \hbar \omega_j(\vec{Q}) \cdot [a_{pj}^\dagger(\vec{Q}) a_{pj}(\vec{Q}) + \frac{1}{2}] , \quad (49)$$

$$H_P^S = \sum_j \sum_{\vec{Q}} \hbar \omega_{Tn} [a_{sj}^\dagger(\vec{Q}) a_{sj}(\vec{Q}) + \frac{1}{2}] . \quad (50)$$

INTERAÇÃO ELETRON-FONON

Nesta seção obtemos o potencial de interação eletrôn-fonon, o qual será utilizado para calcularmos as correções polarônicas em diversos sistemas constituídos por semicondutores.

A energia de interação de um elétron de carga $-e$, na posição

$\vec{r}_e$ com um meio polarizável é

$$H_{ep} = -e.V(\vec{r}_e, t). \quad (51)$$

Usando a expressão para o potencial escalar, equação (6), podemos obter

$$H_{ep} = \frac{2\pi e}{A} \int_{\vec{Q}} dz e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_e} e^{-Q|z-z_e|} [i\hat{e}_{\vec{Q}} + \text{sgn}(z-z_e)\hat{e}_z] \cdot \vec{P}(\vec{Q}, z, t). \quad (52)$$

Fazendo uso da representação de $\vec{P}(\vec{Q}; z, t)$ em termos dos auto-modos de polarização a Hamiltoniana da interação eletrôn-fonon tem finalmente a forma

$$\mathcal{H}_{ep} = \sum_j \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_e} \Gamma_j(\vec{Q}; z_e) (a_{j\vec{Q}} + a_{j-\vec{Q}}^\dagger), \quad (53)$$

onde a função de acoplamento Γ_j é dada por

$$\Gamma_j(\vec{Q}; z_e) = \left(\frac{\pi \hbar e^2}{2A\omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} \int dz e^{-Q|z-z_e|} [i\hat{e}_{\vec{Q}} + \text{sgn}(z-z_e)\hat{e}_z] \cdot \vec{P}^j(\vec{Q}; z). \quad (54)$$

Da equação (54) podemos observar que o eletrôn não interage com os modos transversais ópticos (TO) tanto P com S-polarizados e a razão disto é que os fonons TO não são acompanhados pelo aparecimento de cargas de polarização superficial ou volumétrica.

APLICAÇÕES

Agora que conhecemos o potencial de interação elétron-fônons ópticos, calcularemos as correções polarônicas em alguns sistemas constituídos por junções de semicondutores. Primeiramente calcularemos estas correções em poços quânticos depois em filmes sobre um substrato e finalmente em heterojunções.

(1) POÇOS QUÂNTICOS

Consideraremos o sistema esquematizado ao lado. Em geral, nestes sistemas o elétron é confinado no material I e interage tanto com os modos

interfaciais como com os modos de volume. Vamos calcular, inicialmente, os modos localizados nas interfaces. Para isso precisamos resolver as equações (34) e (35) para as componentes da polarização. Como estamos interessados nos modos interfaciais temos $\epsilon_n(\omega) \neq 0$ e $\chi_n^{\pm}(\omega)$. $\epsilon_n(\omega) \neq 0$. Das equações (34) e (35) obtemos

$$P_{\vec{Q}}(\vec{Q}; z) = \begin{cases} C e^{-Qz} & , z > a \\ A e^{Qz} + B e^{-Qz} & , |z| < a \\ D e^{Qz} & , z < -a \end{cases} \quad (55)$$

e

$$P_z(\vec{Q}; z) = \begin{cases} i C e^{-Qz} & , z > a \\ i(-A e^{Qz} + B e^{-Qz}) & , |z| < a \\ -i D e^{Qz} & , z < -a \end{cases} \quad (56)$$

Onde A, B, C e D são constantes a serem determinadas. Devido à simetria do sistema, podemos dividir as soluções em modos pares e ímpares. Então para os modos pares $A = B$ e $C = D$ e para os modos ímpares $A = -B$ e $C = -D$. Substituindo as equações (55) e (56) nas equações integrais (32) e (33) e impondo que o elétron está no material I podemos obter a relação de dispersão para os modos localizados nas interfaces. Os modos pares satisfazem a relação

$$\frac{E_1(\omega)}{E_2(\omega)} = -\coth Qa, \quad (57)$$

enquanto que os modos ímpares satisfazem a relação

$$\frac{E_1(\omega)}{E_2(\omega)} = -\tanh Qa. \quad (58)$$

Como um caso particular deste resultado, podemos obter a relação de dispersão para um filme (slab) fazendo $\epsilon_2(\omega) = 1$. Estes resultados foram obtidos inicialmente por Licari e Evrard⁽³²⁾ em 1977.

Usando a condição de ortonormalização, equação (24), podemos calcular as constantes A, B, C e D. Para os modos pares teremos

$$A^2 = \frac{q(\epsilon_1(\omega) - 1)^2}{4 \left\{ \frac{\theta_1(\omega)}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(\omega) - 1)^2 \sinh 2Qa + \frac{\theta_2(\omega)}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(\omega) - 1)^2 (1 + \cosh 2Qa) \right\}} \quad (59)$$

$$C^2 = \left[(1 + 2\chi_1^{-1}) e^{2Qa} - 1 \right]^2 A^2 \quad (60)$$

e $B = -A$, $D = -C$. Para os modos ímpares teremos

$$A^2 = \frac{q(\epsilon_1(\omega) - 1)^2}{4 \left\{ \frac{\theta_1(\omega)}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(\omega) - 1)^2 \sinh 2Qa + \frac{\theta_2(\omega)}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(\omega) - 1)^2 (\cosh 2Qa - 1) \right\}} \quad (61)$$

$$C^2 = \left[(1 + 2\chi_1^{-1}) e^{2Qa} + 1 \right]^2 A^2 \quad (62)$$

e $B = A$, $D = C$.

Para calcularmos os potenciais de interação eletron-fonons ópticos utilizamos as equações (55) à (62). A interação com os modos pares é dada por

$$\Gamma_j(\vec{Q}; z) = -\frac{2i}{\sqrt{Q}} \left(\frac{\pi \hbar e^2}{2A\omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} \frac{\cosh Qz}{\left\{ \frac{\theta_1(\omega_j)}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(\omega_j) - 1)^2 \sinh 2Qa + \frac{\theta_2(\omega_j)}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(\omega_j) - 1)^2 (\cosh 2Qa + 1) \right\}^{1/2}} \quad (63)$$

onde $\omega_j(\vec{Q})$ é obtida através da equação (57) e $|z| < a$, A é a unidade de área no plano x-y. A interação com os modos ímpares é dada por

$$\Gamma_j(\vec{Q}; z) = -\frac{2i}{\sqrt{Q}} \left(\frac{\pi \hbar e^2}{2A\omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} \frac{\sinh 2Qa}{\left\{ \frac{\theta_1(\omega_j)}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(\omega_j) - 1)^2 \sinh 2Qa + \frac{\theta_2(\omega_j)}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(\omega_j) - 1)^2 (\cosh 2Qa - 1) \right\}^{1/2}} \quad (64)$$

onde $\omega_j(\vec{Q})$ é obtida através da equação (58) e $|z| < a$.

Novamente podemos obter os resultados de Licari e Evrard para um filme como um caso particular fazendo $\epsilon_2(\omega) = 1$ nas expressões (57), (58), (63) e (64).

Precisamos calcular ainda o potencial de interação entre o eletrón e os fonons longitudinais ópticos (LO) do volume. Para os fonons LO temos $\epsilon_n(\omega_{Ln}) \neq 0$ e $\epsilon_n(\omega_{Lp}) = 0$ com $p \neq n$, então para $\omega = \omega_{Ln}$ teremos $\vec{D}_{Ln} = 0$ e $\vec{E}_{Ln} = -4\pi \vec{P}_{Ln}$. Usando estas informações, podemos resolver as equações diferenciais (34) e (35) e obter os modos de polarização devido aos fonons LO, os quais são

$$P_{Ln}^m(\vec{Q}; z) = C_{Ln}^m \left[i \sin(q_m z) \hat{e}_{\vec{Q}} + \frac{q_m}{Q} \cos(q_m z) \hat{e}_z \right], \quad (65)$$

com $q_m = \frac{\pi}{a} m$, $m = 1, 2, 3, \dots$, e $G_{Ln}^m = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\omega_{pn}}{\omega_m^{1/2}} \frac{Q}{\sqrt{q_m^2 + Q^2}}$.
 Os modos LO do material n são degenerados, ou seja, todos têm a mesma frequência ω_{Ln} . O potencial de interação Γ_{Lo} pode ser calculado usando-se a equação (54) e é dado por

$$\Gamma_{Lo}(\vec{Q}, z) = \left[\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_{L1}}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_0 1} \right) \right]^{1/2} \left[\sum_{m=1,3,5} \frac{\cos\left(\frac{m\pi}{2a} z\right)}{\sqrt{Q^2 + \left(\frac{m\pi}{2a}\right)^2}} + \sum_{m=2,4,6} \frac{\sin\left(\frac{m\pi}{2a} z\right)}{\sqrt{Q^2 + \left(\frac{m\pi}{2a}\right)^2}} \right] \quad (66)$$

onde $\epsilon_{\infty 1}$ e $\epsilon_0 1$ são as constantes dielétricas de alta frequência e estática respectivamente, do material I e V é a unidade de volume.

Uma vez que conhecemos os potenciais de interação eletrôn-fonons ópticos interfaciais e de volume, podemos escrever a Hamiltoniana total do sistema, dentro da aproximação de massa efetiva

$$H = H_e + H_p + H_{e-I} + H_{e-LO} \quad (67)$$

O primeiro termo da Hamiltoniana corresponde ao elétron dentro de um poço de potencial e é dado por

$$H_e = \begin{cases} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_1^*} & , |z| < a \\ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m_2^*} + V_0 & , |z| > a \end{cases} \quad (68)$$

onde m_1^* e m_2^* são as massas efetivas do elétron nos materiais

I e II respectivamente, V_0 é a altura da barreira do poço de potencial unidimensional. O segundo termo corresponde aos fonons livres

$$H_P = \sum_j \sum_{\vec{Q}} \hbar \omega_j(\vec{Q}) a_{\vec{Q}j}^+ a_{\vec{Q}j} + \sum_m \sum_{\vec{Q}} \hbar \omega_{L1} b_{\vec{Q}m}^+ b_{\vec{Q}m}, \quad (69)$$

onde $a_{\vec{Q}j}^+$ ($a_{\vec{Q}j}$) é o operador criação (destruição) de um fonon interfacial de momentum $\hbar \vec{Q}$ e energia $\hbar \omega_j(\vec{Q})$ e $b_{\vec{Q}m}^+$ ($b_{\vec{Q}m}$) é o operador criação (destruição) de um fonon LO de momentum $\hbar \sqrt{Q^2 + q_m^2}$ e energia $\hbar \omega_{L1}$. Devemos observar que o vetor de onda q dos fonons LO é limitado pelo contorno da zona de Brillouin, então

$$\frac{m\pi}{2a} \leq \frac{\pi}{2a_0} \quad \text{ou} \quad m \leq \frac{a}{a_0} \quad (70)$$

onde a_0 é o parâmetro de rede do material I. Como m é um inteiro, deverá assumir valores no intervalo

$$1 \leq m \leq \text{int}(a/a_0) \quad (71)$$

onde $\text{int}(x)$ é a parte inteira de x . Os dois últimos termos correspondem a interação eletrôn-fonon e são dados por

$$H_{e-I} = \sum_j \sum_{\vec{Q}} \Gamma_j(\vec{Q}; z) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} (a_{\vec{Q}j}^+ + a_{\vec{Q}j}) \quad (72)$$

onde Γ_j são dados pelas equações (63) e (64) para os modos pares e ímpares respectivamente e

$$H_{e-10} = \begin{cases} B \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}} \left\{ \left[\sum_{m=1,3,5} \frac{\cos\left(\frac{m\pi}{2a}z\right)}{\sqrt{Q^2 + \left(\frac{m\pi}{2a}\right)^2}} b_{\vec{Q}m}^+ \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{m=2,4,6} \frac{\sin\left(\frac{m\pi}{2a}z\right)}{\sqrt{Q^2 + \left(\frac{m\pi}{2a}\right)^2}} b_{\vec{Q}m}^+ \right] + h.c. \right\}, |z| < a \quad (73) \\ 0, |z| > a \end{cases}$$

onde $B = 2\hbar\omega_{L1} \sqrt{2\pi r_{p1} \alpha_1 / V}$

e $\alpha_1 = \frac{e^2}{2r_{p1}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right) \frac{1}{\hbar\omega_{L1}}$ é a constante de Fröhlich e

$r_{p1} = \left(\hbar / 2m_1^* \omega_{L1} \right)^{1/2}$ é o raio do polaron.

Como é sabido, o acoplamento entre eletrons e fonons em semicondutores é fraco o que permiti-nos calcular as correções polarônicas através de teorias de perturbações. Por simplicidade usaremos um poço de potencial de altura infinita e como o movimento paralelo às interfaces é praticamente livre a função de onda eletrônica pode ser escrita como um produto entre a função de onda do poço $\phi(z)$ e uma onda plana. Evidentemente precisamos utilizar teoria de perturbação de segunda ordem. Os resultados para a correção polarônica na energia de um eletron

ocupando o nível n será

$$\Delta E_n = - \sum_{jn\vec{Q}} \frac{|\langle 0,n | H_{e-1} | n',\vec{Q} \rangle|^2}{E_{n'} - E_n + \hbar\omega_j(\vec{Q}) + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_1^*}} - \sum_{mn'\vec{Q}} \frac{|\langle 0,n | H_{e-L0} | n',\vec{Q} \rangle|^2}{E_{n'} - E_n + \hbar\omega_{L1} + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_1^*}} \quad (74)$$

e a correspondente correção na massa efetiva será

$$\Delta M_n = \frac{\hbar^2}{m_1^*} \sum_{jn\vec{Q}} \frac{Q^2 |\langle 0,n | H_{e-1} | n',\vec{Q} \rangle|^2}{(E_{n'} - E_n + \hbar\omega_j(\vec{Q}) + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_1^*})^3} + \frac{\hbar^2}{m_1^*} \sum_{mn'\vec{Q}} \frac{Q^2 |\langle 0,n | H_{e-L0} | n',\vec{Q} \rangle|^2}{(E_{n'} - E_n + \hbar\omega_{L1} + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_1^*})^3} \quad (75)$$

Os elementos de matriz não nulos entre o estado n , zero fonons e o estado n' , um fonon são facilmente calculados. As expressões da energia e da massa efetiva calculadas para dois sistemas, um constituído por AlAs e GaAs e outro por GaSb e InAs. A função dielétrica usada nos cálculos tanto das relações de dispersão como dos potenciais de interação são dadas por

$$\epsilon_n(\omega) = \epsilon_{\infty n} \frac{\omega_{Ln}^2 - \omega^2}{\omega_{Tn}^2 - \omega^2} \quad , \quad (76)$$

com

$$\epsilon_{\infty n} = 1 + \frac{4\pi n_n \alpha_n}{1 - \frac{4\pi}{3} n_n \alpha_n} \quad , \quad (77)$$

$$\omega_{Ln}^2 = \omega_{0n}^2 + \frac{\frac{2}{3} \omega_{pn}^2}{1 + \frac{8\pi}{3} n_n \alpha_n}, \quad (78)$$

$$\omega_{Tn}^2 = \omega_{0n}^2 - \frac{\frac{1}{3} \omega_{pn}^2}{1 - \frac{8\pi}{3} n_n \alpha_n}, \quad (79)$$

onde $\epsilon_{\infty n}$ é a constante dielétrica óptica, ω_{Ln} e ω_{Tn} são as frequências dos fonons LO e TO respectivamente. A relação de dispersão dos fonons ópticos interfaciais estão plotados nas figuras (1) e (2) para o sistema AlAs-GaAs e GaSb-InAs respectivamente. No limite $Qa \rightarrow 0$ os modos pares tendem para ω_{L2} e ω_{T1} e os modos ímpares para ω_{L1} e ω_{T2} . No limite $Qa \rightarrow \infty$ temos duas frequências assintóticas, 383 cm^{-1} e $278,9 \text{ cm}^{-1}$ para o sistema AlAs-GaAs, $240,7 \text{ cm}^{-1}$ e $224,5 \text{ cm}^{-1}$ para o sistema GaSb-InAs. As correções polarônicas na energia do estado fundamental ($n = 1$) estão plotadas nas figuras (3) e (4) em função da largura do poço. Existem quatro curvas devido à interação com os fonons interfaciais de paridade par e ímpar, e uma devido à interação com os fonons LO confinados no material I. No limite $a \rightarrow 0$ temos somente a contribuição de um modo que neste limite tem frequência igual à do fonon LO do material II. Este resultado era esperado pois na ausência do material I o elétron deve se acoplar com os fonons LO do material II. Entretanto, tanto a correção na energia como a correção na massa efetiva não são as conhecidas correções de um elétron acoplado com os fonons LO de volume do material II,

ou seja $\Delta E_1 = -\frac{\pi}{2} \alpha_2 \hbar \omega_2$ e $\Delta M_1 = \frac{\pi}{8} \alpha_2 m_1^*$, mas sim a de um eletrão bidimensional, ou seja, confinado em um plano e acoplado com os fonons LO do material II. Neste caso, a correção polarônica na energia e na massa efetiva serão, respectivamente iguais à $\Delta E_1 = -\alpha_1 \hbar \omega_1$ e $\Delta M_1 = \frac{\alpha_1}{6} m_1^*$, onde α_1 é a constante de Fröhlich para o material I. Evidentemente este resultado ocorre devido a utilização simplificada do potencial infinito.

Como podemos observar das figuras (3), (4), (5) e (6) a maior contribuição dos fonons interfaciais ocorre quando os poços são estreitos, neste regime suas correções polarônicas podem ser maiores que as correções polarônicas devido à interação com os fonons LO de volume. Evidentemente no estado fundamental ($n = 1$) os modos pares dão as contribuições mais relevantes. Observamos também que o eletrão acopla-se mais fortemente com os modos interfaciais do sistema AlAs-GaAs do que do sistema GaSb-InAs, o que torna o primeiro sistema mais interessante para a confirmação experimental. Recentemente Meynadier e colaboradores (33) observaram a presença de fonons interfaciais e de fonons LO confinados em poços de AlAs-GaAs utilizando espalhamento raman ressonante. Já no segundo sistema, GaSb-InAs, estudos de ressonância ciclotrônica (34) em poços de 200 Å de largura não conseguiram detectar a presença dos efeitos polarônicos. Concluindo, as experiências devem ser realizadas em poços quânticos estreitos para que haja um aumento nas correções polarônicas devido à presença dos fonons interfaciais.

Figuras 1 e 2 - Relação de dispersão dos fonons interfaciais para poços quânticos de AlAs-GaAs e GaSb-InAs.

Figuras 3 e 4 - Energia polarônica do estado fundamental em função da espessura do poço quântico. As contribuições devido à interação com os fonons interfaciais e com os fonons LO do volume são mostrados separadamente para os sistemas AlAs-GaAs e GaSb-InAs. A energia está em unidades de $\alpha_1 \hbar \omega_{L1}$ (a energia do polaron tridimensional).

Figuras 5 e 6 - Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do poço quântico. As contribuições devido à interação com os fonons interfaciais e com os fonons LO de volume são mostrados separadamente para os sistemas AlAs-GaAs e GaSb-InAs. A correção na massa efetiva está em unidades de $\alpha_1/6 m_1^*$ (a correção na massa do polaron tridimensional).

(ii) FILMES SOBRE SUBSTRATOS

O sistema a ser considerado agora consiste em um filme semicondutor de espessura a crescido sobre um substrato que consideraremos ser um material polar para maior generalidade do modelo. Esta geometria é bastante interessante do ponto de vista experimental porque pode-se utilizar várias técnicas para obter-se informações dos modos existentes na superfície e na interface. Além disso pode-se estudar o efeito da oxidação da superfície de um metal nos modos superficiais.

Vamos supor que um elétron esteja confinado no material I (isto na prática é facilmente realizado). Nesta situação o elétron interage com os modos interfaciais, os modos de volume e com os modos da superfície livre.

Para calcularmos as correções polarônicas tanto na energia como na massa efetiva precisaremos obter os modos de polarização, a relação de dispersão dos modos localizados na interface e na superfície, depois obter os potenciais de interação elétron-fonon interfacial, superficial e de volume. Utilizaremos os mesmos métodos usados no caso anterior do poço quântico. A polarização obtida resolvendo as equações (34) e (35) para este sistema específico será

$$P_Q(\vec{r}; z) = \begin{cases} A e^{Qz} + B e^{-Qz}, & 0 \leq z \leq a \\ C e^{Qz}, & z < 0 \end{cases} \quad (80)$$

$$P_z(\tilde{Q}; z) = \begin{cases} i(-A\tilde{c}^{Qz} + Be^{Qz}), & 0 \leq z \leq a \\ -iC e^{Qz}, & z < 0 \end{cases} \quad (81)$$

onde

$$\begin{aligned} B &= e^{2Qa} (2\chi_1^{-1} + 1) A \\ C &= \frac{(e^{2Qa} - 1)(2\chi_1^{-1} + 1)}{2\chi_2^{-1} + 1} A \\ A^2 &= (1 + \chi_1^2 e^{2Qa})(e^{2Qa} - 1) \frac{\theta_1(\omega_j)}{\omega_{p1}^2} + (1 - \chi_1^2 e^{2Qa}) \frac{\theta_2(\omega_j)}{\omega_{p2}^2} \end{aligned} \quad (82)$$

onde χ_i é a suscetibilidade elétrica e a condição de existência de soluções P-polarizadas não triviais leva a relação de dispersão implícita

$$\frac{(\epsilon_1(\omega_j) + 1)(\epsilon_1(\omega_j) + \epsilon_2(\omega_j))}{(\epsilon_1(\omega_j) - 1)(\epsilon_1(\omega_j) - \epsilon_2(\omega_j))} = e^{-2Qa} \quad (83)$$

enquanto os modos LO de volume são determinados por $\epsilon_1(\omega_{L1}) = 0$.

A equação (83) foi resolvida numericamente para dois sistemas, um

constituído por GaAs (material I) e AlAs (material II) e outro constituído por InAs (material I) e GaSb (material II). A relação de dispersão destes modos estão plotados nas figuras (7) e (8). O comportamento destes modos são facilmente estudados nos limites $a \rightarrow 0$ e $a \rightarrow \infty$. No primeiro caso ($a \rightarrow 0$) obtemos $\epsilon_2(\omega_j) = -1$, isto corresponde a um modo superficial do material II, no segundo caso ($a \rightarrow \infty$) obtemos $\epsilon_1(\omega_j) + \epsilon_2(\omega_j) = 0$, que caracterizam os modos da interface e $\epsilon_1(\omega_j) = -1$ que caracterizam os modos da superfície livre. Resolvendo estas condições obtemos as frequências assintóticas dos modos superficiais

$$\omega_{S1} = \left(\frac{\epsilon_{\infty 1} \omega_{L1}^2 + \omega_{T1}^2}{\epsilon_{\infty 1} + 1} \right)^{1/2} \quad (84)$$

e as frequências assintóticas dos modos interfaciais

$$\omega_I \pm = \left\{ \frac{1}{2(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})} \left[\epsilon_{\infty 1} (\omega_{L1}^2 + \omega_{T2}^2) + \epsilon_{\infty 2} (\omega_{L2}^2 + \omega_{T1}^2) \right] \pm \left[\left(\epsilon_{\infty 1} (\omega_{L1}^2 + \omega_{T2}^2) + \epsilon_{\infty 2} (\omega_{L2}^2 + \omega_{T1}^2) \right)^2 - 4(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) \cdot (\epsilon_{\infty 1} \omega_{L1}^2 \omega_{T2}^2 + \epsilon_{\infty 2} \omega_{L2}^2 \omega_{T1}^2) \right]^{1/2} \right\}^{1/2} \quad (85)$$

Para obtermos as expressões (84) e (85) usamos como função dielétrica a equação (76). Para o sistema AlAs-GaAs estes valores são

$$\omega_{S1} = 290 \text{ cm}$$

$$\omega_{I+} = 279 \text{ cm}$$

$$\omega_{I-} = 383 \text{ cm}$$

e para o sistema GaSb-InAs estes valores são

$$\omega_{S1} = 240,77 \text{ cm}$$

$$\omega_{I+} = 240,72 \text{ cm}$$

$$\omega_{I-} = 224,55 \text{ cm}$$

Precisamos agora calcular os potenciais de interação entre elétron-fônons superficiais, elétron-fônons interfaciais e elétron-fônons LO de volume. Através da equação (54) juntamente com as equações (80) à (84) obtemos

$$\Gamma_j(\vec{Q}, z) = \frac{i}{\sqrt{Q}} \left(\frac{\pi \hbar e^2}{2A\omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} (1 - \chi_1) A \left[\chi_1 e^{2Qa} \bar{e}^{-Qz} + e^{Qz} \right], 0 < z < a \quad (86)$$

e

$$\Gamma_j(\vec{Q}, z) = \frac{i}{\sqrt{Q}} \left(\frac{\pi \hbar e^2}{2A\omega_j(\vec{Q})} \right)^{1/2} e^{2Qa} (1 - \chi_1^2) \bar{e}^{-Qz} A, z > a \quad (87)$$

é interessante salientar que nossos resultados recuperam, como casos particulares tanto o resultado de um filme (slab), obtido por Licari e Evrard ⁽³²⁾ como o resultado de um eletrôn interagindo com os modos superficiais de um meio semi-infinito, obtido por G. Mahan. ⁽³⁵⁾ O primeiro caso é recuperado fazendo $\epsilon_2(\omega) = 1$ e o segundo fazendo $a \rightarrow 0$ e $\epsilon_1(\omega) = 1$. Para obtermos as correções polarônicas na energia do estado fundamental e na massa efetiva usaremos os resultados já obtidos para o poço quântico, trocando apenas os potenciais de interação e as relações de dispersão. Observem que a interação do eletrôn com os modos de volume é a mesma que a utilizada no poço quântico, pois nos dois casos estamos utilizando a aproximação de barreiras infinitas. Os resultados que obtivemos para a correção na energia do estado fundamental ($n = 1$) e para a correção na massa efetiva estão plotados nas figuras (9) e (10) para o sistema AlAs-GaAs e nas figuras (11) e (12) para o sistema GaSb-InAs. Como podemos observar a contribuição tanto na massa efetiva como na energia do estado fundamental devido a interação eletrôn-fonon interfacial (-) e superficial aumentam a medida que a espessura do filme aumenta até atingirem um máximo e decaem a zero quando a é muito grande. Os modos LO de volume também têm contribuições que aumentam com a espessura do filme e no limite de espessura muito grande as contribuições são $-\alpha_L \hbar \omega_L$ para a energia e $\frac{\alpha_L}{6} m_i^*$ para a massa efetiva. A interação eletrôn-fonon interfacial (+) no limite em que a espessura do filme tende a zero aproxima-se da

interação elétron-fonon superficial do material semi-infinito cuja a correção na energia é $-\frac{\pi}{2} \alpha_{s2} \hbar \omega_{s2}$ e a correção na massa é $\frac{\pi}{2} \alpha_{s2} m_1^*$ onde

$$\omega_{s2} = \left(\frac{\epsilon_{\infty 2} \omega_{L2}^2 + \omega_{T2}^2}{\epsilon_{\infty 2} + 1} \right)^{1/2} \quad (88)$$

e

$$\alpha_{s2} = 2\pi \left(\frac{m_1^*}{2\hbar^3 \omega_{s2}} \right)^{1/2} e^2 \left(\frac{\epsilon_{02} - 1}{\epsilon_{02} + 1} - \frac{\epsilon_{\infty 2} - 1}{\epsilon_{\infty 2} + 1} \right). \quad (89)$$

Comparando os resultados dos dois sistemas, AlAs-GaAs e GaSb-InAs observamos que os modos interfaciais contribuem mais no primeiro caso do que no segundo tornando-o mais conveniente para a confirmação experimental.

Figuras 7 e 8 - Relação de dispersão para os fonons interfaciais ω_{I+} , ω_{I-} e para os fonons superficiais ω_S .

Figuras 9 e 10 - Energia polarônica do estado fundamental em função da espessura do filme. A linha tracejada (---) é a contribuição dos fonons interfaciais W_{I+} , a linha traço-ponto (-.-) é a contribuição dos fonons interfaciais W_{I-} , a linha pontilhada (....) é a contribuição dos fonons superficiais W_S e a linha cheia é a contribuição dos fonons LO de volume. A energia está em unidades de $\alpha_1 \hbar \omega_{L1}$ (a energia do polaron tridimensional).

Figuras 11 e 12 - Correção polarônica na massa efetiva em função da espessura do filme. As curvas são descritas como nas figuras 9 e 10. A correção na massa efetiva está em unidades de $\alpha_1 m_1^*$.

(iii) HETEROJUNÇÕES

O sistema a ser estudado agora consiste na junção de dois materiais semi-infinitos, de um lado AlGaAs e de outro GaAs. Neste sistema os eletrons ficam confinados em um poço de potencial unidimensional na direção z (conforme figura (13)) e são praticamente livres na direção paralela à interface. Dinamicamente estes eletrons são bidimensionais. Como é bem estabelecido teoricamente, os efeitos polarônicos em um sistema estritamente bidimensional são maiores que os mesmos efeitos em sistemas tridimensionais. Embora este aumento seja esperado devido à perda da regra de seleção para a componente do momentum perpendicular à interface, medidas de ressonância ciclotrônica têm revelado justamente o oposto, ou seja, os efeitos polarônicos são maiores em GaAs tridimensional do que na heterojunção AlGaAs-GaAs. Para explicarmos estes resultados contraditórios precisamos incrementar nosso modelo teórico com dois efeitos importantes. Primeiro o sistema não é estritamente bidimensional mas quase-bidimensional, segundo, o gás de eletrons que ocupa as subbandas é degenerado e portanto efeitos de blindagem na interação eletrôn-fonon também devem ser importantes. Estes dois efeitos foram incorporados na teoria do polaron por Das Sarma e mostrou-se que a interação eletrôn-fonon neste sistema é reduzida em relação ao sistema tridimensional. Entretanto, nestes cálculos

não foram considerados os fonons interfaciais presentes na junção semicondutora, os quais foram detetados experimentalmente através de várias técnicas e devem contribuir nos efeitos polarônicos. Nesta seção calculamos os efeitos polarônicos de um eletrón interagindo com os fonons LO de volume e com os fonons interfaciais e mostramos que nossos resultados concordam muito bem com os resultados experimentais.

Consideremos que no plano $z = 0$ localize-se a interface entre os dois meios semi-infinitos. Para $z > 0$ temos GaAs (meio I) e para $z < 0$ temos $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (meio II). Neste caso os eletrons acoplam-se tanto com os fonons LO do GaAs quanto com os fonons interfaciais. As frequências dos modos interfaciais são obtidas através da equação implícita $\epsilon_1(\omega_j) + \epsilon_2(\omega_j) = 0$. As interações eletrón-fonon LO do volume e com os fonons interfaciais podem ser descrita pela Hamiltoniana de Fröhlich⁽³⁷⁾ a qual é

$$H = H_0 + H_I + H_B \quad (90)$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_j^*} + \frac{p_z^2}{2m_j^*} + V(z) + \sum_j \sum_{\vec{Q}} \hbar \omega_j a_{\vec{Q}j}^+ a_{\vec{Q}j} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} \quad (91)$$

$$H_I = \sum_j \sum_{\vec{Q}} \Gamma_j(\vec{Q}) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}} e^{-Qz} (a_{-\vec{Q}j}^+ + a_{\vec{Q}j}) , \quad (92)$$

$$H_B = \sum_{\vec{q}} D(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sin(q_z z) (b_{-\vec{q}}^+ + b_{\vec{q}}) . \quad (93)$$

onde $\Gamma_j(\vec{Q})$ e $D(\vec{q})$ são obtidos através das equações (54) e (73), o potencial $V(z)$ que confina os eletrons na camada de inversão é, na aproximação de Hartree igual a

$$V(z) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{01}} \int_0^z dz' \int_0^{z'} dz'' N(z'') + \frac{4\pi e^2 N_d}{\epsilon_{01}} z \quad (94)$$

onde ϵ_{01} é a constante dielétrica estática do GaAs, $N(z)$ é a densidade eletrônica e N_d é a densidade de cargas na camada de depleção. Se considerarmos que apenas a primeira subbanda é ocupada e utilizarmos a função de onda variacional proposta por Fang e Howard para a componente z , podemos através de teoria de perturbação de segunda ordem obter a correção polarônica na energia do estado fundamental e na massa efetiva. Essas correções são

$$\Delta E = \sum_j \Delta E_I^j + \Delta E_B , \quad (95)$$

$$\Delta E_I^j = -\alpha_j \hbar \omega_j \int_0^\infty dx \frac{\beta_j^6}{(1+x^2)(\beta_j+x)^2 \epsilon_{2D}(x)^2}, \quad (96)$$

$$\Delta E_B = -\frac{\alpha \hbar \omega_L}{4} \int_0^\infty dx \frac{1}{\epsilon_{2D}(x)^2 (1+x^2)} \left\{ 1 + \frac{x^3}{(1+2x)^3} \left[\frac{3x(3+x)}{2x^2} - \frac{x}{x^2} \right] \right\} \quad (97)$$

onde ΔE_I^j e ΔE_B são as contribuições na energia devido a interação com o j-ésimo modo interfacial e com os modos de volume respectivamente. Os parâmetros β_j e γ são dados por $\beta_j = b (\hbar/2m_j\omega_j)^{1/2}$ e $\gamma = b (\hbar/2m_L\omega_L)^{1/2}$, com

$$b^3 = \frac{48\pi e^2}{\hbar^2 \epsilon_{01}} \left(N_d + \frac{11}{32} N_s \right) \quad (98)$$

onde N_s é a densidade eletrônica. $\epsilon_{2D}(x)$ é a função dielétrica do gás de eletrons quase-bidimensional a qual foi calculada na aproximação das fases aleatórias (RPA) e é dada por⁽⁷⁾

$$\epsilon_{2D}(Q) = 1 + \frac{2}{Q\alpha_0^*} G(Q) \cdot F(Q) \quad (99)$$

$$\text{onde } G(Q) = 1 - \Theta(Q - 2Q_F) \cdot [1 - (2Q_F/Q)^2]^{1/2} \quad (100)$$

e $F(Q)$ é o fator de forma dado por

$$F(Q) = \frac{b}{8} \left[\frac{8b^2 + 9bQ + 3Q^2}{(Q+b)^3} \right] \quad (101)$$

e α_0^* é o raio de Bohr efetivo, $Q_F = \sqrt{2\pi N_s}$. α_j e α são

as constantes de acoplamento do eletrôn com o j -ésimo modo interfacial e com os fonons LD do volume,

$$Q_j = \frac{e^2}{\hbar \omega_j^2} \frac{(2m_i^* \omega_j / \hbar)^{1/2}}{\frac{\theta_1(\omega_j)}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(\omega_j) - 1)^2 + \frac{\theta_2(\omega_j)}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(\omega_j) - 1)^2} \quad (102)$$

e

$$Q = \frac{e^2}{2\hbar \omega_{L1}} \left(\frac{2m_i^* \omega_{L1}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right). \quad (103)$$

A correção polarônica na massa efetiva é dada por

$$\Delta M_P = \sum_j \Delta M_I^j + \Delta M_B \quad (104)$$

onde

$$\Delta M_I^j = 2\alpha_j m_i^* \beta_j^6 \int dx \frac{x^2}{(\beta_j + x)^6 (1 + x^2)^3 \epsilon_{2D}(x)^2}, \quad (105)$$

$$\Delta M_B = \frac{\alpha m_i^*}{3} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{\epsilon_{2D}(x)^2 (1 + x^2)^3} \left\{ 1 + \frac{x^3}{(x + 2x)^3} \left[\frac{3}{2} \frac{x}{x} \left(\frac{3}{2} + \frac{x}{x} \right) - 1 \right] \right\}. \quad (106)$$

é interessante notar que o limite bidimensional não blindado é recuperado fazendo β_j e $\beta_j \rightarrow \infty$ e $\epsilon_{2D}(x) = 1$ nas expressões (95) e (104). Nestes limites teremos

$$\Delta E_p = -\frac{\pi}{2} \sum_j \hbar \omega_j \alpha_j$$

e

(107)

$$\Delta M_p = \frac{\pi}{8} m_i^* \sum_j \alpha_j.$$

Para obtermos a correção polarônica na energia do estado fundamental e na massa efetiva calculamos as integrais das equações (95) e (104) numericamente. No cálculo dos modos interfaciais, embora o material II, $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$ apresente dois conjuntos de fonons TO e LO, um do tipo GaAs e outro do tipo AlAs, consideramos apenas o conjunto do tipo AlAs. As frequências dos interfaciais obtidas são $\hbar \omega_- = 34.4 \text{ meV}$ e $\hbar \omega_+ = 37.5 \text{ meV}$. Os resultados que obtivemos para a energia e para a massa efetiva estão plotados nas figuras (14) e (15) respectivamente, em função da densidade eletrônica. Nestas figuras mostramos separadamente as contribuições dos dois fonons interfaciais e dos fonons LO do volume. Mostramos também para comparação os resultados obtidos usando o modelo proposto por Das Sarma, mas utilizando a blindagem estática na aproximação das fases aleatórias (RPA) em vez da aproximação de Thomas-Fermi (TF). Estes resultados indicam que blindagem e o efeito da função de onda são extremamente importantes para reduzir apreciavelmente as correções polarônicas em heterojunções de GaAs. Na situação experimental $N_d = 4.0 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, a inclusão da função de onda reduz a massa efetiva de $0,046 m_i^*$ para $0,0069 m_i^*$, incluindo efeitos de blindagem este valor é reduzido para $0,0048 m_i^*$ o qual

(39)

está em excelente concordância com a observação experimental que é $0,004 m_1^*$. Como pode ser observado a contribuição dos fonons interfaciais na massa efetiva é da ordem de 25% na situação experimental e não pode ser negligenciada. Quando a densidade eletrônica é aumentada esta contribuição também é aumentada enquanto que a contribuição dos fonons LD do volume é diminuída, neste regime o sistema aproxima-se mais do limite bidimensional.

Figura 13 - Níveis de energia de uma heterojunção GaAs-AlGaAs. A concentração eletrônica é $N_s = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. A linha representa o potencial efetivo e a linha tracejada o potencial de Hartree.

Figura 14 - Energia polarônica na heterojunção GaAs-AlGaAs em função da densidade eletrônica N_s . A linha tracejada (---) corresponde à contribuição dos fonons interfaciais W_{I+} , a linha traço-ponto (-.-.) corresponde à contribuição dos fonons interfaciais W_{I-} , a linha pontilhada (....) corresponde à contribuição dos fonons LO de volume, a linha cheia fraca é a contribuição total e a linha cheia forte é o resultado obtido usando o modelo de Das Sarma.

Figura 15 - Correção polarônica na heterojunção GaAs-AlGaAs em função da densidade eletrônica N_s . As curvas são descritas na figura 14.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES

Neste trabalho estuda-se a interação elétron (exciton)-fonon em vários sistemas semicondutores tais como poços quânticos, heterojunções, fios quânticos e filmes semicondutores sobre substratos semicondutores. No capítulo I estuda-se os efeitos polarônicos (massa efetiva e energia de ligação) de um elétron ligado à uma impureza hidrogênica doadora localizada ou no centro ou na barreira de um poço quântico de GaAs-AlGaAs em função da densidade eletrônica e da largura do poço. Mostra-se que os efeitos de blindagem reduzem drasticamente a energia do estado fundamental assim como os efeitos polarônicos. No capítulo II calcula-se a energia dos estados $1s$, $2s$ e $2p_x$ de um exciton (leve ou pesado) em poços quânticos de GaAs-AlGaAs, através de um formalismo variacional, em função da concentração de alumínio e da espessura dos poços. Mostra-se que a interação exciton-fonon LO aumenta a energia de ligação dos excitons e uma boa concordância com os resultados experimentais é obtida.

Os excitons em fios quânticos de GaAs-AlGaAs são estudados no capítulo III através de um formalismo variacional. Calcula-se a energia do estado fundamental dos excitons leves e pesados em função dos lados L_x e L_y do fio e mostra-se que esta energia é

superior à energia dos excitons em poços quânticos e fortemente dependente da área transversal dos fios. Os efeitos polarônicos na energia de ligação foram também calculados e da mesma maneira que nos poços quânticos aumentam a estabilidade dos excitons. No capítulo IV estuda-se a interação elétron-fonon LO em fios quânticos de GaAs-AlGaAs através de teoria de perturbação de segunda ordem. Mostra-se que tanto a energia como a massa efetiva têm correções que são sempre maiores que nos sistemas tridimensionais e quase-bidimensionais.

Finalmente, no capítulo V estuda-se os fonons interfaciais e superficiais em poços quânticos, heterojunções e filmes semicondutores sobre substratos semicondutores. Calcula-se as relações de dispersão para estes fonons, o potencial de interação elétron-fonon interfacial (superficial) e os efeitos polarônicos em poços quânticos de GaAs-AlAs e InAs-GaSb, heterojunções de GaAs-AlGaAs e filmes de GaAs e InAs crescidos sobre substratos de AlAs e GaSb, respectivamente. Mostra-se que os efeitos polarônicos destes fonons são importantes quando a espessura dos poços ou filmes é pequena.

Em todos os sistemas estudados é mostrado que a interação elétron (exciton)-fonon é importante e não pode ser desprezada para uma comparação quantitativa com os resultados experimentais.

REFERÊNCIAS

- 1- Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors, San Francisco, 1984, editado por J.D.Chadi e W.A.Harrison (Springer-Verlag, New York, 1984).
- 2- G.Bastard, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).
- 3- C.Mailhot, Yia-Chung Chang e T.C.McGill, Phys. Rev. B 26, 4449 (1982).
- 4- R.L.Greene e K.K.Bajaj, Solid State Commun. 45, 825 (1983).
- 5- K.Tanaka, M.Nagoka e T.Yamabe, Phys. Rev. B 28, 7068 (1983).
- 6- J.A.Brum, G.Bastard e C.Guillemot, Phys. Rev. B 30, 905 (1984).
- 7- T.Ando, A.B.Fowler e F.Stern, Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982).
- 8- T.D.Lee, F.E.Low e D.Pines, Phys.Rev. 90, 297 (1953).
- 9- R.Dingle, W.Wiegmann e C.H.Henry, Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
- 10- R.Dingle, Festkorperprobleme (Advances in Solid State Physics) vol 15, editado por H.J.Queisser (Braunschweig:Vieweg) pag. 21.
- 11- C.Weisbuch, R.C.Miller, R.Dingle, A.C.Gossard e W.Wiegmann, Solid State Commun. 37, 219 (1981), R.C.Miller, D.A.Kleinman, W.A.Nordlan e A.C.Gossard, Phys. Rev. B 22, 863 (1980).
- 12- R.C.Miller, D.A.kleinman, W.I.Tsang e A.C.Gossard, Phys. Rev.

- B 24, 1134 (1981).
- 13- M.H.Meynadier, C.Delalande, G.Bastard, M.Voos, F.Alexandre e J.L.Lievin, Phys. Rev. B 31, 5539 (1985).
 - 14- P.Dawson, K.J.Moore, G.Duggan, H.I.Ralph e C.T.B.Foxon, Phys. Rev. B 34, 6607 (1986).
 - 15- J.C.Maan, G.Belle, A.Fasolino, M.Altarelli e K.Ploog, Phys. Rev. B 30, 2253 (1984).
 - 16- S.Tarucha, H.Okamoto, Y.Iwasa e N.Miura, Solid State Commun. 52, 815 (1984).
 - 17- D.C.Rogers, J.Singleton, R.J.Nicholas, C.T.Foxon e K.Woodbridge, Phys. Rev. B 34, 4002 (1986).
 - 18- J.M.Luttinger e W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955).
 - 19- K.S.Chan, J.Phys. C: Solid State Phys. 19, L125 (1986).
 - 20- V.Chitta, M.H.Degani, A.Cohen e G.E.Marques, Phys. Rev. Lett. (submetido)
 - 21- A.Hartstein, R.A.Webb, A.B.Fowler e J.J.Wainer, Surf. Sci. 142, 1 (1984).
 - 22- A.B.Fowler, A.Hartstein e R.A.Webb, Phys. Rev. Lett. 48, 196 (1982).
 - 23- R.G.Wheeler, K.K.Choi, A.Goel, R.Wisnieff e D.E.Prober, Phys. Rev. Lett. 49, 1674 (1982).
 - 24- W.J.Skocpol, L.D.Jackel, E.L.Hu, R.E.Howard e L.A. Fetter, Phys. Rev. Lett. 49, 951 (1982).
 - 25- R.F.kwasnick, M.A.Kastner, J.Melngailis e P.A.Lee Phys. Rev. Lett. 52, 224 (1984).

- 26- H.Sakaki, Jpn.J.Appl.Phys. 19, L735 (1980).
- 27- P.M.Petroff, A.C.Gossard, R.A.Logan e W.Wiegmann, Appl.Phys.Lett. 41, 635 (1982).
- 28- J.Lee e H.N.Spector J.Appl.Phys. 54, 3921 (1985).
- 29- G.W.Bryant, Phys.Rev. B 29, 6632 (1984), B 31, 7812 (1985).
- 30- F.A.P.Osório, M.H.Degani, O.Hipólito, Phys.Rev. B (a sair).
- 31- S.Das Sarma e Wu-Yang Lai, Phys.Rev. B 32, 1401 (1985).
- 32- J.Licari e R. Evrard, Phys. Rev. B 15, 2254 (1977).
- 33- M.H.Meynadier, E.Finkman, M.D.Sturge, J.M.Worlock e M.C.Tamargo, Phys.Rev. B 35, 2517 (1987).
- 34- M.Ziesmann, H.Heitmann e L.L.Chang, Phys.Rev. B 35, 4551 (1987).
- 35- G.D.Mahan, Elementary Excitations in Solids, Molecules and Atoms, Part B, editado por J.T.Devreese, A.B.kunz e T.C.Collins (Plenum Press, London, 1974).
- 36- S.Das Sarma, Phys.Rev. B 27, 2590 (1983); Surf.Sci. 142, 341 (1984).
- 37- H.Frohlich, Proc.R.Soc.London 215, 291 (1952).
- 38- F.F.Fang e W.E.Howard, Phys. Rev. Lett. 16, 797 (1966).
- 39- G.Lindemann, W.Seidenbusch, R.Lassing, J.Edlinger e E.Gornick, Physica 117B & 118B, 649 (1983).