UNIVERSIDADE DE SAO PAULO
INSTITUTO DE FISICA E QUIMICA DE SAO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FISICA E CIENCIA DOS MATERIAIS

"Excitons em Estruturas Semicondutoras
Quasi-Unidimensionais"

Roberto Ricardo Panepucci

Dissertação apresentada ao IFQSC-USP
para obtenção do título de Mestre em
"Física Básica".

Prof.Dr.Oscar Hipólito

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

São Carlos - São Paulo

1990

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE ROBERTO RICARDO PANEPUCCI APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 22 DE AGOSTO DE 1990.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Hipolito

Prof. Dr. Liderio C. Ioriatti Junior

Prof. Dr. Nelson Studart Filho

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

Ao Professor *Oscar Hipólito* pela orientação segura, por ter me apresentado a assuntos fascinantes;

Aos Professores *Marcos Henrique Degani* e *Francisco A. P. Osório* pelas discussões férteis e entusiasmantes;

Aos colegas do *DFCM* e a todos que contribuíram direta ou indiretamente para este trabalho;

À *Irene* pelo excelente trabalho de edição;

Ao Professor *Horácio C. Panepucci* pelas discussões e questionamentos sempre estimulantes e paciência quasi-infinita;

À *Máyra*, com amor;

Aos meus pais e irmãos;

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (*CNPq*) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (*FAPESP*) pelo auxílio financeiro.

ÍNDICE DE FIGURAS

figura 1 — Banda de condução (E_c) e valência (E_v) para uma estrutura de poço quântico tipo I. estão mostrados os parâmetros do poço e do material: as barreiras e as massas para elétrons e buracos. Esta evidenciado na figura o fato de que as massas dos portadores são diferentes nas regiões I e II. No destaque, as funções de onda de subbanda e as energias das subbandas E_1 e H_1 .

figura 2 — Variação da energia de ligação do estado fundamental E do HHE (linhas cheias) e do LHE (linhas tracejadas) como função da largura (L) do poço de Ga As para concentrações de Al $x=0.15$ e $x=0.3$ e para barreiras infinitas. A descontinuidade na banda de condução é tomada como sendo 85% da descontinuidade total na energia do gap entre Ga As e Ga Al As. (ref.(9))

figura 3 — A geometria do fio que foi utilizada. Indicamos em cada região o potencial para o elétron e para o buraco. Neste modelo consideramos que a direção de crescimento (100) é y .

figura 4 — Função de onda calculada para um fio quântico formado a partir de um poço quântico de 100Å com largura lateral de 300Å para heterojunções formadas a partir de InP/InGaAs. Como se pode notar, a função de onda tem amplitude considerável mesmo fora do poço. Um cálculo com as mesmas dimensões do fio para o Ga As / Ga Al As no nosso modelo fornece "dimensões" iguais a 70Å x 146Å. (a figura acima foi extraída da ref.(38) por Gershoni et al)

figura 5 — Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 6 — Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 7 - Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 8 - Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 9a - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE) e pesados (HHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 9b - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE) e pesados (HHE) como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 10 - Energia de ligação do HHE e do LHE como função dos lados do fio para barreiras infinitas. As curvas solidas e tracejadas representam a energia de ligação com e sem a inclusão da interação com fônons, respectivamente. (da ref.(20)) (Obs. a autoenergia dos portadores livres nao foi considerada.)

figura 11 - Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 12 - Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 13 - (a) Energia de ligação do HHE como função do raio para um fio cilindrico e barreiras finitas. Os parâmetros usados são característicos do GaAs envolto em

GaAlAs, com $V_e/V_h = 0.85/0.15$. (b) Energia de ligação do LHE como função do raio. Os parâmetros são os mesmos que em (a), exceto que o valor de $V_e/V_h = 0.6/0.4$. (da ref.(36))

figura 14 – Energia de ligação do HHE e do LHE como função do lado do fio quântico quadrado para diferentes valores da barreira de potencial. Os numeros em parenteses indicam a concentração de Al nas direções z e y, respectivamente. As curvas solidas e tracejadas correspondem ao caso com e sem interação de éxciton-fônon. (da ref. (37)) (Obs. a auto energia dos portadores livres nao foi considerada.)

figura 15 – Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 10.000A, 20.0000A, 30.000A e 40.000A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 16 – Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 10.000A, 20.0000A, 30.000A e 40.000A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 17 – Energia de ligação de um éxciton pesado (HHE) e "dimensões" da função de onda como função da largura L_y do fio para um fio com área 60.000A. As curvas se referem a : 1-energia de ligação do éxciton; 2-"dimensão" do elétron em x; 3-"dimensão" do elétron em y; 4-"dimensão" do buraco em x; 5-"dimensão" do buraco em y; 6-"dimensão" do éxciton em z. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 18 – Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 19 – Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 20 - Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 21 - Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A, 150A e 200A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 22 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 23 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 24 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 25 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50A, 100A e 150A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 26 - (a) Diagrama de energias mostrando o deslocamento dos níveis devido a inclusão da interação com fônons. (b) Energia de ligação do éxciton como função da largura L de um poço quântico com concentração de Al igual a 0.3 (FPB) e barreiras

infinitas (IPB). As curvas solidas e tracejadas mostram resultados com e sem a inclusão da interação com fônons. Curvas tracejadas com pontos mostram o resultado obtido com a utilização da constante dieletrica optica.

figura 27 – Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 28 – Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são: (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 29 – Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 30 – Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 31 – Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 20.0000A, 30.000A e 40.000A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 32 – Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 20.0000A, 30.000A e 40.000A. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	01
Éxcitons em Poços Quânticos.	02
Interação Elétron- Buraco- Fônon.	08
 CAPÍTULO 1 - ÉXCITON EM FIOS QUÂNTICOS	
1.1. Introdução.	12
1.2. Desenvolvimento Teórico.	13
1.3. Discussão dos Resultados.	20
1.3.1. Éxcitons em Fios Quânticos com Perfis Regulares	20
1.3.2. Éxcitons em Fios Quânticos com Perfis Quadrados	22
1.3.3. Éxcitons em Fios Quânticos com Perfil Variável e Área Constante	24
 CAPÍTULO 2 - ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM INTERAÇÃO COM FÔNONS	27
2.1 - Introdução.	28
2.2 - Desenvolvimento Teórico	28
2.3 - Análise dos Resultados	34
2.3.1 - Éxcitons em Fios Quânticos com Perfis Retangulares e Interação com Fônons	34
2.3.2 - Éxcitons em Fios Quânticos com Perfis Quadrados e Interação com Fônons	35
2.3.3 - Éxcitons em Fios Quânticos com Perfil Variável e Área Constante e Interação com Fônons	35
 CAPÍTULO 3 - CONCLUSÃO	37
APÊNDICE A	41
REFERÊNCIAS	46

RESUMO

Neste trabalho estudamos o comportamento da energia de ligação de um éxciton em um fio quântico. O modelo utilizado considera barreiras finitas e seção transversal retangular. Utilizamos o método variacional com uma função de onda tentativa na forma gaussiana. Os parâmetros do material utilizados no cálculo são os do GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Incluímos a anisotropia das massas dos buracos leve e pesado, que é gerada pelo confinamento na direção y , desprezando outros efeitos na estrutura de banda. Comparamos nossos resultados com cálculos teóricos existentes.

Estudamos também o efeito da interação com fônons sobre a energia de ligação do éxciton no fio quântico. Para tanto utilizamos um método variacional conjugado com transformações unitárias proposto por Lee-Low-Pines.

ABSTRACT

In this work we study the behavior of the exciton binding energy in a quantum wire. The model assumes finite barrier height and a rectangular cross section. A variational method is used with a Gaussian trial wave function. The material parameters used in the calculations are those of the GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. The heavy and light hole mass anisotropies arising from confinement in the wire direction is included, while other effects in the band structure are neglected. The present results are compared with other authors calculations.

The effect of the fonon interaction on the exciton binding energy in the quantum wire are analised. For this purpouse a variational method conjugated with unitary transformations as proposed by Lee—Low—Pines was employed.

INTRODUÇÃO

O estudo sobre propriedades ópticas de éxcitons em estruturas de baixa dimensionalidade, particularmente em poços quânticos teve início com o trabalho de Dingle e colaboradores ⁽¹⁾ em 1974. Os éxcitons, que são estados ligados de um elétron de condução e um buraco de valência, dominam as propriedades ópticas de superredes e poços quânticos na região espectral do gap fundamental ⁽²⁾. Estas propriedades ópticas incluem absorção, fotoluminescência e espalhamento Raman ressonante, entre outras. Experimentos magneto-ópticos e de fotocondutividade também tem sido utilizados para se obter um quadro mais completo do problema. Os efeitos associados aos éxcitons tem, também, importância tecnológica pois fornecem mecanismos para a construção de diversos dispositivos ópticos, uma vez que, por exemplo, a absorção excitônica é bem definida em poços quânticos semicondutores III-V mesmo a temperaturas ambientes. Entre estes dispositivos ópticos estão: dispositivo de efeito auto electro-óptico (self-electro-optic-effect device (SEED))⁽³⁾; portas lógicas ópticas (all-optic logical gates ⁽⁴⁾); e moduladores eletro-ópticos com QW's (Quantum Wells) e etalon de Fabry-Pérot crescido em uma única estrutura epitaxial ⁽⁵⁾. Estes dispositivos são peças fundamentais no desenho de computadores ópticos. Suas características de operação, com voltagens e intensidades luminosas compatíveis com valores típicos em estruturas semicondutoras, justificam o atual esforço em obter características específicas e principalmente compreender os mecanismos fundamentais nos quais se baseiam. Neste contexto se insere o problema aqui estudado, da energia de ligação de éxcitons.

A energia de ligação do éxciton é a energia necessária para ionizá-lo, isto é, a energia mínima que o par elétron-buraco deve receber para desligar-se. Este é um valor importante, pois é o fato de que a energia de ligação aumenta com o

confinamento dos portadores nas regiões do poço, que permite a existência do éxciton a altas temperaturas, uma vez que o espalhamento por fônons (cujas energias, no caso de fônons ópticos, são da ordem ou maiores que a energia de ligação (E_{lig})) é muito frequente se comparada com temperaturas de nitrogênio a de hélio líquidos.

O fio quântico é um caso especial de heteroestrutura semicondutora cujo desenvolvimento e aperfeiçoamento, apesar de recentes, tem despertado um interesse crescente nos últimos anos. Nosso trabalho visa contribuir para a compreensão dos aspectos teóricos que esta estrutura apresenta, em particular o conhecimento do comportamento da energia de ligação de éxcitons no fio quântico.

Pretendemos aqui introduzir a terminologia necessária à discussão da questão da energia de ligação de éxcitons em estruturas semicondutoras. Consideramos a seguir o problema de um poço quântico.

ÉXCITONS EM POÇOS QUÂNTICOS

Um poço quântico é obtido quando justapomos camadas de materiais semicondutores que possuem gaps diferentes. Podemos ter duas situações: poço tipo I, onde a diferença de potencial gerada pela descontinuidade do gap confina, no mesmo material, elétrons e buracos; ou tipo II onde elétrons e buracos estão confinados em regiões espaciais diferentes (camadas diferentes). Vamos considerar apenas estruturas tipo I, que tem sido mais estudadas, justamente por oferecerem as características mais interessantes até o momento. A Hamiltoniana que descreve um par elétron-buraco neste sistema, na aproximação de massa efetiva e bandas parabólicas esfericamente simétricas, é:

$$H = \varepsilon_g + \frac{P_e^2}{2m_e} + \frac{P_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{\epsilon|\vec{r}_h - \vec{r}_e|} + V_e(z_e) + V_h(z_h) \quad (1)$$

onde o potencial de confinamento é

$$V_i(z_i) = \begin{cases} 0 & |z_i| < \frac{L}{2} \\ V_i & |z_i| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad i = e, h \quad (2)$$

m_e , m_h são as massas efetivas de elétrons e buracos respectivamente. A constante dielétrica ϵ , que blinda a interação elétron-buraco, a ser utilizada é discutida adiante. ε_g é o "gap" do GaAs.

Caso não houvesse interação coulombiana os auto estados desse sistema seriam:

$$\psi_0(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = N e^{i(\vec{k}_{\perp e} \cdot \vec{\rho}_e + \vec{k}_{\perp h} \cdot \vec{\rho}_h)} \chi_{n,e}(z_e) \chi_{m,h}(z_h) \quad (3)$$

onde $\chi_{n,i}$ é a autofunção para a partícula i , no poço unidimensional $\vec{\rho}_i$ é o vetor posição no plano do poço, e a energia E será:

$$E(k_{\perp e}, k_{\perp h}, n, m) = \varepsilon_g + E_n + H_m + \frac{\hbar^2 k_{\perp e}^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_{\perp h}^2}{2m_h} \quad (4)$$

A energia mínima necessária para criar um par excitado é $\varepsilon_g + E_1 + H_1$.

Este resultado significa que o limiar de absorção por portadores livres foi deslocado para regiões no espectro de maior energia ("blue shift"). Os termos E_n e H_m são as energias das "subbandas" do elétron e do buraco, respectivamente, ligados no poço. Um estado eletrônico na aproximação de massa efetiva que estamos

utilizando é então descrito por um número quântico (a subbanda) e dois valores para as duas coordenadas do momentum no plano (X,Y).

O procedimento usual é transformar as coordenadas do sistema para o referencial do centro da massa, na direção em que os portadores estão livres, neste caso o plano (X,Y). Neste novo sistema, a Hamiltoniana fica sendo:

$$H = \epsilon_g + \frac{P_{\perp}^2}{2(m_e + m_h)} + \frac{p_{\perp}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + \frac{p_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{p_{z_h}^2}{2m_h} + V_e(z_e) + V_h(z_h) \quad (5)$$

A solução do problema pode ser obtida aproximadamente por meio do método variacional, tendo como funções de onda tentativas

$$\varphi(z_e, z_h, \rho) = N_1 \chi_{1,e}(z_e) \chi_{1,h}(z_h) \exp(-\rho/\lambda) \quad (6a)$$

ou

$$\varphi(z_e, z_h, \rho) = N_2 \chi_{1,e}(z_e) \chi_{1,h}(z_h) \exp \left[-\frac{1}{\lambda} \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2} \right] \quad (6b)$$

Embora a segunda solução reproduz o resultado do bulk ao fazermos $L \rightarrow \infty$, o cálculo numérico é consideravelmente mais longo e complexo que o da primeira, que é razoável para uma região de valores L tal que $L < a_0^*$ (a_0^* é o raio de Bohr efetivo do éxciton no material).

Neste ponto precisamos introduzir na discussão o fato de que, em geral, para a estrutura zincblende (GaAs por exemplo) existem duas bandas de buracos,

que no bulk estão degenerados no ponto $\vec{k} = 0$ (ignorando a degenerescência de spin).

Como essas bandas tem massas diferentes são denominadas bandas de buracos pesados (HH) e bandas de buracos leves (LH). Associados a cada uma dessas bandas temos o éxciton de buraco pesado (HHE - heavy hole exciton) e o éxciton de buraco leve (LHE - light hole exciton).

Para cada tipo de éxciton temos duas quantidades, denominadas fatores de escala *

que são o raio de Bohr efetivo e o Rydberg efetivo, definidos como

$$R_{hh}^0 = \mu_{hh} e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2; R_{lh}^0 = \mu_{lh} e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2 \quad (7)$$

$$a_{hh}^0 = \hbar^2 \epsilon / \mu_{hh} e^2; a_{lh}^0 = \hbar^2 \epsilon / \mu_{lh} e^2 \quad (8)$$

onde $\mu_{\alpha h} = m_{\alpha h} m_e / (m_{\alpha h} + m_e)$, $\alpha = h, \ell$ é a massa reduzida do éxciton.

Neste modelo o LHE é sempre menos ligado que o HHE pois:

1. os buracos na subbanda LH_1 estão sempre menos confinados que os buracos na subbanda HH_1 . Assim a interação efetiva elétron-buraco é menor no plano da camada que constitui o poço.
2. o Rydberg efetivo do LHE é sempre menor que o do HHE uma vez que $m_{lh} < m_{hh}$.

Este modelo simplista não leva em conta a interação entre as bandas de

* (são assim chamados pois se escrevemos o Hamiltoniano adimensional, em cada caso em unidades de R_{hh}^0 ou R_{lh}^0 e distâncias em termo de a_{hh}^0 ou a_{lh}^0 ele tem a mesma expressão).

valência que no GaAs/GaAlAs é importante. Baldereschi e Lipari ⁽⁶⁾ mostraram que a Hamiltoniana do éxciton nestes semicondutores pode ser escrita como:

$$H_{exc} = P(\vec{r}, \vec{p})1 + \begin{bmatrix} Q & L & M & O \\ L^* & -Q & O & M \\ M^* & O & -Q & -L \\ O & M^* & -L^* & Q \end{bmatrix} \quad (9)$$

onde Q, L e M envolvem apenas parâmetros da banda de valência enquanto P envolve m_e e o termo coulombiano $-e^2/\epsilon r$.

De fato,

$$P(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2\mu_0} - \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (10)$$

com

$$\frac{1}{\mu_0} = \frac{1}{m_e} + \frac{\gamma_1}{m_0} \quad (11)$$

onde γ_1 é um dos parâmetros de Luttinger ⁽⁷⁾ que descreve a cinética dos buracos no ponto Γ_8 .

Uma aproximação utilizada por Miller et al ⁽⁸⁾ e Greene e Bajaj ⁽⁹⁾ é desprezar os termos L e M que apesar de serem da mesma ordem de Q estão fora da diagonal. Neste caso a Hamiltoniana fica

$$H^i = \frac{P_{ze}^2}{2m_e} + \frac{P_{zi}^2}{2m_i} - \frac{e^2}{\epsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + \frac{P_{\perp}^2}{2\mu_i} \quad i = hh, \ell h \quad (12)$$

onde m_i e μ_i são definidos como:

$$1/m \begin{pmatrix} h & h \\ \ell & h \end{pmatrix} = (1/m_0) \cdot (\gamma_1 \pm 2\gamma_2); 1/\mu \begin{pmatrix} h & h \\ \ell & h \end{pmatrix} = 1/m_e + (1/m_0)(\gamma_1 \pm \gamma_2) \quad (13)$$

O efeito prático desta aproximação é alterar as massas efetivas nas direções perpendiculares a z . No caso do GaAs em particular ocorre uma inversão isto é $\mu_{\ell h} > \mu_{hh}$.

Este fato leva à obtenção de energias de ligação para o buraco leve maiores do que para o buraco pesado. Isto ocorre quando o confinamento dos buracos é "completo". Quando a largura do poço (L) diminui, a função de onda do buraco leve tem maior penetração na barreira (vazamento da função de onda). Isso se deve à sua menor massa na direção z . Então a interação elétron-buraco leve fica mais fraca e a energia de ligação do HHE torna-se maior. Esse fato está ilustrado na figura (2).

O primeiro valor reportado para a energia de ligação de éxcitons $1s$ em poços quânticos de GaAs com larguras $L_z > 100 \text{ \AA}$ foi de 9 meV a partir da análise do espectro de absorção óptica ⁽¹⁾. Medidas desse tipo tem o problema inerente de determinar o limiar da absorção por portadores ionizados (livres).

Miller e Kleinman ⁽¹⁰⁾ determinaram por meio de análise do espectro de absorção óptica as energias de ligação de $HHE's$ e $LHE's$. Fazendo uso da polarização da luz, que privilegia transições entre $LH_1 - E_1$ ou $HH_1 - E_1$, eles determinaram com maior precisão o limiar de $LH_1 - E_1$, que está imerso no contínuo de $HH_1 - E_1$. Seus resultados confirmaram a expectativa de que $E_{lig}^{HHE} < E_{lig}^{LHE}$.

Técnicas magneto ópticas sugeriram um método direto de obter a energia de ligação de éxciton. As transições ópticas associadas a "níveis de Landau" de pares desligados observados a campo alto até então eram extrapoladas linearmente até $B = 0$ (campo nulo). O ponto onde a curva interceptaria o eixo da energia seria

o limiar de absorção por partículas "livres". Trabalhos posteriores ⁽¹¹⁾ utilizaram o resultado de Akimoto e Hasegawa ⁽¹²⁾ que determinaram expressões para a energia dos estados ligados em vários regimes de campo magnético, para éxcitons puramente bidimensionais. Eles propuseram um método de ajuste para os dados experimentais cujos parâmetros são a massa do buraco pesado, o coeficiente de não parabolicidade da banda de condução e a "dimensionalidade" do éxciton. Este método é mais correto pois tem-se afirmado que todas as linhas observadas em transições ópticas em campos magnéticos finitos são de éxcitons ligados ⁽¹³⁾. Isto está estabelecido, porém, apenas para éxcitons bidimensionais ⁽¹¹⁾.

Cálculos teóricos mais sofisticados, levando em conta a não parabolicidade da banda de condução e o acoplamento das bandas de valência foram realizados ⁽¹⁴⁻¹⁵⁾. As conclusões estão resumidas abaixo.

Com a inclusão do acoplamento das bandas de valências:

- (a) As energias de ligação dos HHE e LHE, E_{lig}^{HHE} e E_{lig}^{LHE} aumentam, sendo o aumento maior de E_{lig}^{LHE} pois a subbanda LH torna-se mais não-parabólica que a banda HH.
- (b) O aumento na energia de ligação é menor do que o esperado (particularmente na subbanda LH devido à forte não parabolicidade) pois a massa reduzida é dominada pela massa do elétron.

Incluindo a interação intersubbanda, as energias de ligação tem um aumento menor. Novamente o aumento é maior para E_{Lg}^{LHE} pois ele está imerso no contínuo E - HH e portanto exhibe uma ressonância tipo Fano.

INTERAÇÃO ELÉTRON- BURACO- FÔNON

figura 2 - Variação da energia de ligação do estado fundamental E do HHE (linhas cheias) e do LHE (linhas tracejadas) como função da largura (L) do poço de Ga As para concentrações de Al $x=0.15$ e $x=0.3$ e para barreiras infinitas. A descontinuidade na banda de condução é tomada como sendo 85% da descontinuidde total na energia do gap entre Ga As e Ga Al As. (ref.(9))

A interação de um portador com os íons da rede dá origem ao chamado "polaron". Sua origem pode ser compreendida se analisarmos o que ocorre com uma partícula carregada, por exemplo o elétron em uma rede cristalina iônica. Neste caso não é difícil imaginar que o elétron vai interagir com os átomos nos seus sítios, deslocando-os da sua posição de equilíbrio, criando uma polarização. Os íons positivos deslocam-se na sua direção e os íons negativos na oposta. A energia do portador neste caso é diminuída por uma quantidade chamada auto energia, pois polarizando a rede ele se estabiliza. Além disso ao mover-se, o portador deve carregar a nuvem de polarização consigo, aumentando sua massa. Os efeitos polarônicos em uma partícula composta, tal como o exciton em um poço quântico, deve ter aspectos diferentes daqueles do elétron no bulk. Se o raio do exciton $\langle r_0 \rangle$ é muito maior que a soma do raio polarônico do elétron, R_e , com o raio polarônico do buraco, R_h , ambos elétron e buraco reduzem suas energias pela sua auto energia. Suas massas são trocadas pelas massas polarônicas e a interação elétron-buraco é blindada pela constante dielétrica estática ϵ_0 . Assim um raio grande implica em uma energia cinética pequena pelo princípio da incerteza, e os íons tem então condições de acompanhar o movimento dos portadores. No limite oposto em que $\langle r_0 \rangle \ll R_e + R_h$, os efeitos polarônicos para o elétron e para o buraco se cancelam devido ao sinal de carga oposto dos dois portadores, e o efeito polarônico líquido torna-se pequeno. A interação coulombiana elétron-buraco é blindada agora com a constante dielétrica infinita (U.V.) já que os íons não acompanham mais o movimento dos portadores.

A interação éxciton-fônon como mecanismo de deslocamento da energia de ligação foi tratada por um pequeno número de trabalhos ⁽¹⁶⁻²¹⁾ sendo que em alguns, o fato da auto energia do elétron e do buraco ter sido desprezada, superestimou a contribuição éxciton-fônon.

Neste trabalho incluímos de forma correta a interação com fônons, com-

paramos nossos resultados para o fio, qualitativamente com resultados obtidos para o poço quântico (quando possível, também com resultados obtidos para a impureza).

A interação éxciton-fônon contribui também para o surgimento de outras estruturas nos espectros de absorção e fotoluminescência, bem como no de espalhamento Raman ressonante. Estes aspectos da interação estão revistos num recente trabalho de revisão por Nash e Mowbray ⁽²²⁾.

Outras propriedades de heteroestruturas nas quais a interação de portadores com fônons ópticos é manifestada são, aumento da massa polarônica ⁽²³⁻²⁴⁾ ressonância de magneto-fônons ⁽²⁵⁻²⁶⁾, relaxação de portadores quentes ⁽²⁷⁻²⁸⁾, o tunelamento ressonante ⁽²⁹⁻³⁰⁾, etc.

Uma análise ponderada do comportamento de éxcitons em estruturas quânticas, notadamente na presença de campos magnéticos, parece ainda impraticável com a literatura até hoje existente. Apesar do número de publicações, as diferenças e não uniformidades dos resultados, tanto teóricos como experimentais, bem como as diferentes interpretações de resultados aparentemente semelhantes ⁽¹³⁻³¹⁾ não permitem um consenso.

A seguir discutiremos de forma mais aprofundada os aspectos teóricos associados aos sistemas éxcitons e éxcitons-fônons em fios quânticos.

CAPÍTULO 1

1.1. INTRODUÇÃO

O avanço tecnológico que tem possibilitado o controle preciso de crescimento epitaxial, e com isso a confecção de heterojunções, poços quânticos e superredes, vem revolucionando a física de dispositivos e de semicondutores. O caminho parece naturalmente levar à confecção de estruturas de menor dimensão, fios quânticos e caixas quânticas - quantum well wires e quantum dots. Estes assuntos vem sendo estudados há aproximadamente uma década. Estudos tanto teóricos como experimentais vem apresentando resultados novos comparados ao equivalente em poços quânticos. A modificação adicional na estrutura de banda causada pelo confinamento em uma segunda dimensão, deve resultar em novas e intrínsecas propriedades físicas que vão colaborar na construção de dispositivos ópticos como moduladores e lasers, ampliando o espectro de possibilidades de aplicação dos poços quânticos já discutido.

Vamos considerar aqui uma estrutura que apresenta confinamento bi-dimensional. Esta estrutura é obtida quando restringimos um grau de liberdade do poço quântico, este é exatamente um dos processos experimentais utilizados para a obtenção de estruturas quase uni-dimensionais. Outros processos utilizados para obter confinamento lateral (outra forma de se referir ao confinamento bi-dimensional), que envolvem técnicas experimentais mais tratáveis, como implantação orientada de íons de Ga no plano do poço, geram perfis de potencial de confinamento complexos. Estes perfis vão desde parabólico⁽³²⁾ a função erro⁽³³⁾. Um outro tipo de técnica que utiliza crescimento sobre substratos não planares atinge confinamento quasi-unidimensional em regiões de tensão devido ao conflito da estrutura que cresce em direções diferentes ⁽³⁴⁾.

Estas e outras técnicas geram perfis difíceis de tratar teoricamente com

um formalismo simples que não exija cálculo numérico *à priori*. Neste trabalho, para discutir a energia de ligação do éxciton confinado em um fio quântico, escolhemos um determinado perfil para a estrutura. Este perfil é o mesmo utilizado em outro trabalho semelhante por Osório *et al* ⁽³⁵⁾, com o qual fazemos algumas comparações significativas pois corroboram vários dos nossos resultados.

O modelo consiste de três regiões: uma de Arseneto de Gálio (Ga As) Puro (Região 0); outra de Arseneto de Gálio Alumínio ($Ga_{1-x}Al_xAs$) (Região 1) e uma terceira também de $Ga_{1-y}Al_yAs$ (Região 2) porém com uma concentração de Al diferente (em princípio $x \neq y$). A disposição destas regiões e suas interfaces está mostrada na figura (3).

Outros cálculos teóricos sobre o comportamento da energia de ligação de éxcitons em fios quânticos utilizaram por exemplo: perfil cilíndrico e barreiras finitas⁽³⁶⁾; perfil retangular e barreiras infinitas⁽²⁰⁾; ou perfil quadrado (devido ao tipo de aproximação separável) e barreira finita⁽³⁷⁾. Neste sentido obtivemos resultados que não foram observados, ou previstos.

1.2. DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

A energia de ligação, como já dissemos, é a energia necessária para ionizar o éxciton. Para obter seu valor subtraímos o valor da energia do estado fundamental do éxciton no fio quântico (que é um estado equivalente ao 1 s no caso do átomo de hidrogênio), do valor total da energia do par elétron-buraco livre (sem interação) no fio.

Como o problema para a partícula livre seguindo a condição de contorno correta na superfície do fio não tem solução analítica, (exige-se que a derivada da função de onda nos cantos do retângulo se anulem em todas as direções, ou seja, grad

$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = 0$) adotamos a solução utilizada por Osório *et al* ⁽³⁵⁾, que concluíram que no caso de impurezas hidrogenóides em fios quânticos a utilização de uma função de onda gaussiana dá melhores resultados que uma solução tipo soma de dois poços separáveis. No apêndice A comparamos resultados que obtivemos com diferentes funções de onda para o poço quântico. A função gaussiana, como mostramos mais adiante, fornece, ao minimizarmos as energias, um estado mais localizado que se supusermos soluções tipo poço, que são senos ou cossenos. Estamos falando aqui da função de onda de partícula livre, também chamada função de onda da subbanda. Esta conclusão não está de acordo com um resultado obtido recentemente a partir da diagonalização de uma matriz 225×225 por Gershoni *et al* ⁽³⁸⁾ (ver fig. (4)).

Vamos supor aqui que o confinamento separa suficientemente as subbandas LH e HH de modo que não vamos considerar seu acoplamento. Temos portanto dois sistemas desacoplados de éxcitons, o leve (LHE) e o pesado (HHE). Considerando bandas parabólicas, na aproximação de massa efetiva temos para o Hamiltoniano de um par elétron-buraco interagindo coulombicamente num fio quântico de GaAs envolto por GaAlAs, a seguinte expressão:

$$H = E_g + \frac{P_{x_e}^2 + P_{y_e}^2}{2m_e} + \frac{P_{x_h}^2}{2m_{hx}} + \frac{P_{y_h}^2}{2m_{hy}} + \frac{P_z^2}{2\mu_z} + \frac{e^2}{\epsilon_0[(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + z^2]^{\frac{1}{2}}} + V(x_e, y_e, x_h, y_h) \quad (1)$$

onde E_g é o "gap" do GaAs; m_e , m_{hz} , m_{hy} e m_{hx} são as massas de banda: do elétron, do buraco ao longo de z , de y e de x obtidas na aproximação proposta por Greene ⁽⁸⁾ que despreza os termos não diagonais na Hamiltoniana de Luttinger (ver Introdução). M_z , μ_z as massas total e reduzida, respectivamente, ao longo de z . (p_z, z) são o momentum relativo e a coordenada relativa entre elétron e buraco, respectivamente. O potencial de confinamento proposto neste trabalho é definido

AS MASSAS DOS BURACOS LEVE E PESADO SÃO DADAS POR:

$$m_{yhh} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$$

$$m_{ylh} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$$

$$m_{xhh} = m_{zhh} = \frac{1}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

$$m_{xlh} = m_{zlh} = \frac{1}{\gamma_1 - \gamma_2}$$

OS PARÂMETROS DE LUTTINGER SÃO:

$$\gamma_1 = 6.85 \text{ e } \gamma_2 = 2.1, \text{ PARA } GaAs$$

$$\gamma_1 = 6.85 - 3.4x \text{ e } \gamma_2 = 2.1 - 1.42x, \text{ PARA } Ga_{1-x}Al_xAs$$

$$\gamma_1 = 6.85 - 3.4y \text{ e } \gamma_2 = 2.1 - 1.42y, \text{ PARA } Ga_{1-y}Al_yAs$$

figura 3 - A geometria do fio que foi utilizada. Indicamos em cada regioao o

potencial para o elétron e para o buraco. Neste modelo consideramos que a direção de crescimento (100) é y.

$$d_{\text{WELL}} = 100 \text{ \AA}$$

$$d_{\text{WIRE}} = 300 \text{ \AA}$$

figura 4 - Função de onda calculada para um fio quântico formado a partir de um poço quântico de $100 \text{ \AA}$ com largura lateral de $300 \text{ \AA}$ para heterojunções formadas a partir de InP/InGaAs. Como se pode notar, a função de onda tem amplitude considerável mesmo fora do poço. Um cálculo com as mesmas dimensões do fio para o Ga As / Ga Al As no nosso modelo fornece "dimensões" iguais a $70 \text{ \AA} \times 146 \text{ \AA}$. (a figura acima foi extraída da ref.(38) por Gershoni et al)

como:

$$V(x_e, y_e, x_h, y_h) = V_e(x_e, y_e) + V_h(x_h, y_h)$$

$$V_i(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 & |x_i| < L_x/2 \quad |y_i| < L_y/2 \\ V_{ix} & |x_i| > L_x/2 \quad |y_i| < L_y/2 \\ V_{iy} & |y_i| > L_y/2 \end{cases} \quad (2)$$

A constante dielétrica que faz a blindagem da interação elétron-buraco é a estática ϵ_0 , já que $a_0^* > R_e + R_h$. Escolha usual na literatura ⁽⁹⁾.

O valor da descontinuidade do gap ΔE_g entre GaAs e o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ é tida com $\Delta E_g = (1040x + 470x^2) \text{ meV}$. As barreiras de potencial para o elétron e o buraco são, respectivamente, 60% e 40% de ΔE_g . (Esses valores não estão estabelecidos).

Escolhemos agora uma função de onda tentativa (variacional) para o estado fundamental do éxciton que tem a forma simples:

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \left(\frac{\alpha_e \beta_e}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\alpha_h \beta_h}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha_e^2 x_e^2 + \alpha_h^2 x_h^2 + \beta_e^2 y_e^2 + \beta_h^2 y_h^2 + \lambda z^2)}. \quad (3)$$

Com esta função calculamos o valor esperado da Hamiltoniana $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ que deve se minimizado com relação aos parâmetros variacionais $\alpha_e, \beta_e, \lambda, \alpha_h, \beta_h$. Obtemos E como:

$$E = E_{cin} + E_{pot} + E_{coul}. \quad (4)$$

Nas expressões abaixo escrevemos energias em unidades de Rydberg efetivo (Ry^*), massas em unidades tais que a massa reduzida na região 0, ao longo de z seja igual à unidade ($\mu_{0z} = 1$)

E_{cin} é a energia cinética, que pode ser decomposta nas três direções (x,y,z)

$$E_{cin} = E_{cx} + E_{cy} + E_{cz}. \quad (5)$$

Nas direções x e y temos a soma direta das energias cinéticas do elétron e do buraco

$$E_{cx} = E_{cx}^e + E_{cx}^h, \quad (6)$$

onde E_{cx}^i é calculada como:

$$E_{cx}^i = \left\langle \frac{p_{xi}^2}{2m_i} \right\rangle = - \int \int \int d\vec{r}_i \frac{1}{m_i(\vec{r}_i)} \nabla_{\vec{r}_i}^2 \psi(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad ; i \neq j = (e, h). \quad (7)$$

Esta integral deve ser separada nas três regiões 0, 1 e 2, já que a massa é diferente em cada uma delas.

Obtemos então

$$E_{cx}^i = \frac{\alpha_i^2}{2} \left(\frac{1}{m_{2i}} + \left(\frac{1}{m_{1i}} - \frac{1}{m_{2i}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{\beta_i L_y}{2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{m_{1i}} \operatorname{erf} \left(\frac{\beta_i L_y}{2} \right) \left(1 - \frac{m_{1i}}{m_{0i}} \right) \left(\frac{L_x \alpha_i}{\sqrt{\pi}} e^{(-\frac{L_x \alpha_i}{2})^2} - \operatorname{erf} \left(\frac{\alpha_i L_x}{2} \right) \right) \right) \quad (8)$$

Analogamente calculamos a expressão para E_{cy} , que também pode ser decomposta como

$$E_{cy} = E_{cy}^e + E_{cy}^h \quad (9)$$

onde

$$E_{cy}^i = \frac{\beta_i^2}{2} \left(\frac{1}{m_{2i}} + \left(\frac{1}{m_{2i}} - \frac{1}{m_{1i}} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\alpha_i L_x}{2} \right) \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{m_{0i}} \operatorname{erf} \left(\frac{\alpha_i L_x}{2} \right) \right) \times \left(\frac{L_y \beta_i}{\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{L_y \beta_i}{2} \right)^2} - \operatorname{erf} \left(\frac{L_y \beta_i}{2} \right) \right) \right) \quad (10)$$

Como nosso potencial não tem simetria de rotação por um ângulo de $\pi/2$ não esperamos que $E_{cx} = E_{cy}$ como de fato não são.

Para determinar a energia cinética temos um trabalho adicional já que agora a massa utilizada é a reduzida e os portadores em regiões diferentes tem massas diferentes. Temos então:

$$E_{cz} = \frac{\lambda}{2} \sum_{m,n=0}^2 \frac{I_m^e I_n^h}{\mu_{mn}}, \quad (11)$$

onde μ_{mn} é a massa reduzida entre um elétron na região m e um buraco na região n

$$\frac{1}{\mu_{mn}} = \frac{1}{m_{me}} + \frac{1}{m_{nh}}. \quad (12)$$

$$I_2^i = \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\beta_i L_y}{2} \right) \right) \quad (13a)$$

$$I_1^i = \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\alpha_i L_x}{2} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{\beta_i L_y}{2} \right) \quad (13b)$$

$$I_0^i = \operatorname{erf}\left(\frac{\alpha_i L_x}{2}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{\beta_i L_y}{2}\right) \quad (13c)$$

Aqui $\operatorname{erf}(x)$ é a função erro que é dada por

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (14)$$

O termo E_{pot} é a contribuição da energia potencial das barreiras, sua expressão é:

$$E_{pot} = \langle \psi | V_e(z_e) + V_h(z_h) | \psi \rangle$$

$$E_{pot} = E_{pot}^e + E_{pot}^h \quad (15)$$

com

$$E_{pot}^i = V_{i2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\beta_i L_y}{2}\right)\right) + V_{i1} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\alpha_i L_x}{2}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{\beta_i L_y}{2}\right). \quad (16)$$

A interação entre elétron e buraco é dada por

$$E_{coul} = \langle \psi | \frac{-2}{\sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + z^2}} | \psi \rangle, \quad (17)$$

para realizar as integrais envolvidas escreveremos

$$\frac{1}{\sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + z^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} e^{-t(x_e - x_h)^2 - t(y_e - y_h)^2 - tz^2}, \quad (18)$$

as integrações são então simplificadas, sendo todas gaussianas. Ficamos com:

$$E_{coul} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \alpha_e \beta_e \alpha_h \beta_h \sqrt{\lambda} \int_0^\infty F(t) dt, \quad (19)$$

onde

$$F(t) = \frac{1}{\sqrt{((\alpha_e^2 + \alpha_h^2)t^2 + \alpha_e^2 \alpha_h^2)) ((\beta_e^2 + \beta_h^2)t^2 + \beta_e^2 \beta_h^2) (t^2 + \lambda)}} \quad (20)$$

Claramente esta expressão é simétrica com relação à troca $e \rightarrow h$.

A energia de ligação é então obtida subtraindo-se o valor minimizado da expressão para E , que é a energia do estado fundamental do éxciton, do valor E_{sub} . E_{sub} é a energia do par elétron buraco sem a interação coulombiana e é obtido minimizando a mesma expressão para E sem o termo de interação coulombiana.

Podemos, com este resultado, reobter o resultado de Osório *et al* ⁽³⁵⁾ para a energia do estado fundamental de uma impureza. Para tanto devemos considerar o limite em que $m_{h_x} = m_{h_y} = m_{h_z} \rightarrow \infty$. Este limite é obtido corretamente ao fazermos $\alpha_h, \beta_h \rightarrow \infty$ com $\frac{\alpha_h^2}{m_h}, \frac{\beta_h^2}{m_h} \rightarrow 0$. Isto é análogo a tomar a possibilidade de encontrar o buraco como $\delta(\vec{r}_h)$, a impureza está localizada no centro do fio. Neste limite a expressão para o termo E_{coul} fica simplesmente

$$E_{coul} = -2 \frac{\alpha_e \beta_e \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dt \frac{1}{\sqrt{(\alpha_e^2 + t)(\beta_e^2 + t)(\lambda + t)t}}. \quad (21)$$

que é idêntico ao de Osório *et al.*

Um potencial de confinamento semelhante ao que utilizamos pode ser obtido por uma técnica de “etching” (ataque químico seletivo) e “regrowth” (recrescimento) já comentado (41).

Consegue-se este perfil (esquemmatizado na figura (3) através do “etching” (mesa “etching” - ataque que retira o material normalmente à superfície, criando um perfil retangular) de uma amostra de poços quânticos QW 's. O “etch” é conseguido por um processo opticamente ativado, que só ataca regiões não protegidas por “photoresist”. Essas regiões são lineares (retangulares a rigor) ao longo da direção (1,1,0). (obs. a direção de crescimento dos poços quânticos é a (0,0,1)). Esta direção é a que deixa exposta uma superfície onde os “íons” estão energeticamente mais favoráveis. Posteriormente novo crescimento de GaAlAs é feito.

1.3. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Apresentamos a seguir resultados obtidos para a energia de ligação de éxcitons em algumas situações nas quais são os variados parâmetros físicos que caracterizam o fio, e.g. sua área.

1.3.1. ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM PERFIS RETANGULARES

Na figura (5) mostramos os resultados obtidos para a energia de ligação

do éxciton associado ao buraco pesado (HHE) em um fio quântico com seção retangular. Para a obtenção destes resultados utilizamos uma concentração de alumínio igual, nas regiões 1 e 2, a 0.3. Os resultados análogos, obtidos para concentrações de alumínio iguais a 0.15 (portanto barreiras de potencial menores) estão mostrados na figura (6). Estes resultados mostram um comportamento para a energia de ligação semelhante ao que ocorre nos poços quânticos (veja a introdução). Aqui também observamos os efeitos do aumento da energia de ligação com a diminuição de L_y , e um decréscimo a partir de um valor (o máximo) que depende da dimensão L_x . O máximo nas curvas mostradas nas figuras (5) e (6) é mais pronunciado naquelas curvas que tem um confinamento maior (menor L_x). Também é fácil notar que estes máximos estão melhor definidos no caso em que a concentração de Al é mais baixa (figura (6)), inclusive ocorrendo em valores maiores de L_y .

Resultado análogo, como já dissemos, é conhecido em poços quânticos. Nestes a energia de ligação cai devido ao "vazamento" da função de onda de uma das duas partículas para fora do poço. O "vazamento" da função de onda é consequência do aumento da energia cinética da partícula com o confinamento (uma consequência direta do princípio da incerteza). Para reduzir sua energia cinética a partícula "vaza" para a barreira aumentando sua energia potencial mas reduzindo com vantagem sua energia cinética (neste estágio a energia da partícula está próxima do limiar absoluto de liberdade; o gap do material que compõe a barreira).

A ocorrência dos pontos de máximo para valores maiores de L_y no caso do gráfico da figura (6), em que a concentração de Al é 0.15, é facilmente compreendida, já que neste caso a opção de "vazar" para a barreira é mais vantajosa que em poços onde a concentração de alumínio é maior e portanto a barreira é maior.

O outro fato que notamos nestes gráficos é o deslocamento do ponto de máximo para regiões maiores de L_y com a diminuição de L_x . A correlação entre

elétron e buraco é aumentada com o confinamento adicional e por isso as curvas com L_x menores tem para todos valores de L_y , uma energia de ligação maior. O deslocamento do ponto de máximo é causado pelo “vazamento” da função de onda na direção L_x , que neste modelo tem uma massa anisotrópica, menor na direção x .

Nos gráficos das figuras (7) e (8) mostramos resultados análogos aos discutidos acima, obtidos para o éxciton associado ao buraco leve (LHE). O comportamento observado em ambos os sistemas HHE e LHE é o mesmo. A característica que diferencia os resultados é a ocorrência dos pontos de máximo para valores maiores de L_y . Este deslocamento se deve unicamente à menor massa do buraco leve em relação ao pesado, na direção y . O portador com massa menor tem uma energia cinética maior para um mesmo confinamento ($E_{cin} \propto \frac{1}{m}$), facilitando seu “vazamento” para valores maiores de L_y .

Nas figuras (9 a,b) mostramos uma comparação entre os resultados para o HHE e para o LHE. O comportamento das curvas é análogo ao obtido para poços quânticos discutido na introdução. Uma vez que o modelo inclui a anisotropia da massa do buraco, e no caso do GaAs a massa reduzida no plano (X,Z) do HHE é menor que a do LHE, a energia de ligação do LHE é maior do que a do HHE até o ponto em que a função de onda do buraco leve “vaza” e conseqüentemente a energia do LHE cai, invertendo a situação.

Os resultados para a energia de ligação do éxciton em fios quânticos com perfil retangular e barreiras infinitas obtidos por Degani e Hipólito (fig. (10)) tem valores consideravelmente maiores que os que obtivemos. Contudo a tendência observada aqui leva à expectativa de valores maiores com o aumento da barreira, eventualmente alcançando os valores da fig. (10).

1.3.2. ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM PERFIL QUADRADO

Obtivemos resultados para fios com perfil quadrado. Os gráficos (nas figuras (11,12)) mostram o comportamento da energia de ligação como função da aresta L do quadrado, tanto para o HHE como para o LHE e uma comparação entre ambos. Nestes gráficos a concentração de Al nas regiões 1 e 2 é mudada.

Os resultados obtidos para o perfil quadrado mostram um comportamento semelhante ao observado anteriormente porém mais acentuado já que o “confinamento” neste caso aumenta quadraticamente com L .

O resultado obtido para o perfil quadrado (curva 1) pode ser comparado com o resultado de Brown e Spetor ⁽³⁶⁾ obtido para o fio cilíndrico, mostrado na fig. (13). Ambos tem o máximo da energia de ligação bem definido. Uma comparação quantitativa entretanto não é possível.

Notamos uma diferença no comportamento relativo das curvas 2 e 3 nos gráficos das figuras (11) e (12) para o HHE e o LHE. Na curva 2 as concentrações (x,y) correspondentes às regiões 1 e 2, respectivamente são $(0.1, 0.3)$ e na curva 3 são $(0.3, 0.1)$.

No caso do HHE, para grandes valores de L , ambas partículas, elétrons e buracos, estão eficazmente confinadas no fio, a diferença entre as curvas correspondentes às situações $(0.1, 0.3)$ e $(0.3, 0.1)$ é que, no primeiro caso, o movimento ao longo de x tem massa pequena e enfrenta uma barreira menor que no segundo caso, por isso a energia de ligação é ligeiramente menor (já que no limite $L \rightarrow \infty$ a barreira não deve alterar E_{lig}). Para menores valores de L , elétron e buraco continuam confinados na direção y apenas no caso $(0.1, 0.3)$ quando a barreira ainda é grande. No caso em que as concentrações são $(0.3, 0.1)$, o confinamento na direção y é eficaz apenas para o buraco, que tem uma massa grande, a função de onda eletrônica no entanto “vaza” e assim a interação elétron - buraco é reduzida, diminuindo a energia de ligação.

Para o caso do LHE o comportamento para L pequeno é análogo ao do HHE, entretanto, devido à anisotropia das massas o vazamento da função de onda eletrônica que leva à redução na energia de ligação para fios com L menor ocorre na direção x , onde a massa do ℓh é maior que a do e . Na direção y , como as massas de e e ℓh são semelhantes, a perda de correlação não é tão significativa quando há “vazamento” das funções de onda. Para L grande no caso de LHE o movimento ao longo de y enfrenta uma barreira menor com menor massa, por isso a curva $(0.3, 0.1)$ é sempre menor que a $(0.1, 0.3)$ ao contrário do que ocorre para HHE. Esta análise é válida enquanto as funções de onda dos estados ligados e desligados (sem-interação) são aproximadamente iguais, quando a função de onda do estado sem-interação começa a “vazar” a discussão acima, em termos da função de onda do estado ligado não pode descrever adequadamente o comportamento da energia de ligação pois esta é a diferença de energia entre os estados ligado e desligado. No caso acima a condição foi satisfeita no intervalo discutido.

Degani e Hipólito ⁽³⁷⁾ (fig. (14)) no cálculo realizado supondo função separáveis para o fio finito, com um perfil quadrado obtiveram um comportamento análogo para E_{lig} . O modelo, que também inclui a anisotropia nas massas dos buracos, não apresentou o comportamento observado aqui para oHHE no caso em que as concentrações eram $(0.1, 0.3)$ e $(0.3, 0.1)$.

1.3.3. ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM PERFIL VARIÁVEL E ÁREA CONSTANTE

Nas figuras (15,16) estão graficados valores de energia de ligação de HHE e LHE como função da dimensão L_y do fio para fios com áreas de seção transversal diferentes tomando os valores $10.000 \text{ \AA}^2$; $20.000 \text{ \AA}^2$; $30.000 \text{ \AA}^2$ e $40.000 \text{ \AA}^2$. Nestes

gráficos nota-se que a energia de ligação varia com o perfil do fio tendo um valor maior para perfis quadrados.

Nota-se nos gráficos das figuras (15,16) que há uma estrutura para valores pequenos de L_y que é mais acentuada para fios com áreas maiores. Na figura (17) mostramos num mesmo gráfico a energia de ligação do HHE e as “dimensões” da função de onda para um fio com área $60.000\text{\AA}^2$. Essas dimensões são os valores em angstroms para os quais a probabilidade toma o valor $\frac{1}{e}$ ($|\psi_i(x_i)|^2 = \frac{1}{e}, i = e, h$).

O comportamento da energia de ligação do HHE pode ser dividido em três partes : 1) diminuição de E_{lig} com o decréscimo de L_y ; 2) ligeiro aumento de E_{lig} com o subsequente decréscimo de L_y e 3) diminuição acentuada de E_{lig} com a quase anulação de L_y .

Esse comportamento é explicado diretamente pela correlação entre as funções de onda eletrônica e do buraco nas direções x (curva 2 e 4) e y (curvas 3 e 5) – A energia de ligação cai com o aumento na diferença entre as “dimensões” das funções de onda.

É necessário compreender o comportamento da função de onda para entender a dependência observada para a energia de ligação. Para justificar a diminuição de E_{lig} no trecho 1 vemos que com a redução de L_y , L_x deve aumentar de modo que a área é constante. Na direção x o hh tem massa maior que o e cuja “dimensão” aumenta mais rapidamente (curva 2) que a do hh (curva 4). Este é o efeito predominante no trecho 1. No trecho 2 observamos uma diminuição das “dimensões” de e e hh (curvas 2 e 4) isto se deve ao fato de que a diminuição das “dimensões” ao longo de y (curva 3 e 5) devido ao confinamento, aumentam a interação coulombiana pois aumenta a carga efetiva dentro do fio. Este aumento de carga favorece a aproximação do par elétron-buraco, inclusive na direção z (curvas 2, 4 e 6). O comportamento análogo para o poço quântico foi observado por Bastard

et al ⁽³⁹⁾ que observavam uma diminuição no “raio efetivo de Bohr” variacional utilizado no cálculo (ver introdução). Finalmente no trecho 3 o “vazamento” da função de onda eletrônica anterior ao “vazamento” da função de onda do buraco destrói a correlação anterior e a energia de ligação cai .

CAPÍTULO 2

2.1. INTRODUÇÃO

O efeito da interação com fônons na energia de ligação de estados coulombicamente ligados já foi calculada para vários valores da constante de acoplamento e em diversos materiais no "bulk" ⁽⁴⁰⁾.

No caso de estados coulombicamente ligados em heteroestruturas semicondutoras apenas um número pequeno de autores dedicou-se ao problema ^(16,17,18,19,20,21). As conclusões sobre os efeitos da interação com fônons em particular a interação éxciton-fônon, até o momento não estão estabelecidas.

Nos resultados que apresentamos a seguir observa-se um comportamento oposto ao que foi observado até o momento, uma vez que com este modelo para o fio quântico a inclusão da interação com fônons leva a uma diminuição da energia de ligação do éxciton. Resultados anteriores ^(16,21) que também incluem correções de auto energia de portadores livres no caso de poços quânticos mostraram que a interação polarônica aumenta ligeiramente a energia de ligação.

2.2. DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

A interação de portadores carregados com fônons longitudinais ópticos é descrita pela Hamiltoniana de Frohlich ⁽⁴²⁾. Para determinarmos sua contribuição na energia de ligação do éxciton incluímos o termo de interação e o termo de fônons livres na equação (1.1). Na aproximação de massa efetiva a Hamiltoniana de um éxciton em um fio quântico de GaAs envolto por GaAlAs interagindo com os fônons ópticos do GaAs é escrita como:

$$\begin{aligned}
H = & E_g + \frac{P_{xe}^2 + P_{ye}^2}{2m_e} + \frac{P_{xh}^2}{2m_{hx}} + \frac{P_{yh}^2}{2m_{hy}} + \frac{P_z^2}{2\mu_z} + \frac{P_z^2}{2M_z} - \\
& - \frac{e^2}{\epsilon_\infty[(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + z^2]^{\frac{1}{2}}} + V(x_e, y_e, x_h, y_h) + \\
& + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \left[\Gamma_{\vec{q}} e^{iq_z Z} \left(e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_e} e^{i\gamma_h q_z Z} - e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_h} e^{-i\gamma_e q_z Z} \right) a_{\vec{q}}^+ + h.c. \right].
\end{aligned} \tag{1}$$

Aqui $a_{\vec{q}}^+$ ($a_{\vec{q}}$) é o operador criação (destruição) de fônons longitudinais ópticos com vetor de onda $\vec{q} = (\vec{Q}, q_z)$ e frequência ω . $\Gamma_{\vec{q}}$ é o coeficiente de Fourier da interação elétron-buraco-fônon dado por

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

Ω é o volume do sistema, e

$$\gamma_e = m_e/M_z, \quad \gamma_h = m_{hz}/M_z. \tag{3}$$

A blindagem da interação elétron-buraco é feita apenas pela constante dielétrica óptica, já que a polarização da rede é levada em conta no termo de interação elétron-buraco-fônon.

A Hamiltoniana acima pode ser separada em 4 termos, a saber:

$$H = H_0 + \frac{P_z^2}{2\mu_z} + H_{ph} + H_{int}. \tag{4}$$

O primeiro é a Hamiltoniana já tratada no capítulo 1, do éxciton com centro de massa fixo do longo de z . O segundo é a energia do centro de massa ao longo de z

e o terceiro e quarto, os termos de fônons livres e a interação elétron-buraco fônon, respectivamente.

Pode-se verificar que o momentum total ao longo de z , $P_T = P_z + \sum_{\vec{q}} \hbar q_z a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}}$, é uma constante de movimento, já que comuta com a Hamiltoniana H . A técnica de solução que adotaremos é processar uma transformação unitária em H ,

$$U_1 = \exp \left(-iZ \sum_{\vec{q}} q_z a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} \right) \quad (5)$$

que elimina a coordenada Z do centro de massa ⁽⁴³⁾

A seguir calculamos o valor esperado da nova Hamiltoniana em um estado tentativo com a forma :

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \left(\frac{\alpha_e \beta_e}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\alpha_h \beta_h}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha_e^2 x_e^2 + \alpha_h^2 x_h^2 + \beta_e^2 y_e^2 + \beta_h^2 y_h^2 + \lambda z^2)} U_2 |0\rangle \quad (6)$$

que é o produto da função de onda já utilizado no capítulo 1 e um operador de deslocamento de coordenadas de fônons aplicado ao estado de vácuo dos fônons. U_2 é dado por :

$$U_2 = \exp \left(\sum_{\vec{q}} (f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^+ - f_{\vec{q}}^* a_{\vec{q}}) \right). \quad (7)$$

As funções $f_{\vec{q}}$ e $f_{\vec{q}}^*$ devem ser obtidas minimizando-se o valor esperado da Hamiltoniana.

O valor esperado, $E = \langle \psi | U_1^{-1} H U_1 | \psi \rangle$ tem a forma :

$$\begin{aligned}
E = & \langle \psi | H_0 | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{P_T^2}{2M_z} | \psi \rangle + \\
& + \sum_{\vec{q}} \{ \Gamma_{\vec{q}} f_{\vec{q}} G_{\vec{q}} + \hbar c \} + \frac{\hbar^2}{2M_z} \left[\sum_{\vec{q}} |f_{\vec{q}}|^2 q_z \right]^2 + \\
& + \sum_{\vec{q}} |f_{\vec{q}}|^2 \left(\hbar \omega - \frac{\hbar q_z}{M_z} P_T + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2M_z} \right).
\end{aligned} \tag{8}$$

onde

$$G_{\vec{q}} = \langle \psi | e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_e} e^{i\gamma_{\hbar} q_z z} - e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_h} e^{i\gamma_e q_z z} | \psi \rangle. \tag{9}$$

Minimizamos esta expressão com relação a $f_{\vec{q}}$, $f_{\vec{q}}^*$, ou seja impomos que $\frac{\delta E}{\delta f_{\vec{q}}} = \frac{\delta E}{\delta f_{\vec{q}}^*} = 0$ e obtemos

$$f_{\vec{q}}^* = \frac{-\Gamma_{\vec{q}} G_{\vec{q}}}{\left\{ \hbar \omega - \frac{\hbar q_z P_T}{M_z} + \frac{\hbar^2 q_z^2}{M_z} + \frac{\hbar^2}{M_z} \left[\sum_{\vec{q}'} |f_{\vec{q}'}|^2 q_z' \right] q_z \right\}}. \tag{10}$$

Vamos fazer $P_T = 0$ ($P_T = 0$ é o estado envolvido na absorção óptica). Por não haver um sentido preferencial ao longo de z (já que $P_T = 0$), e pela simetria do problema podemos afirmar que teremos

$$\frac{\hbar^2}{M_z} q_z \left[\sum_{\vec{q}'} |f_{\vec{q}'}|^2 q_z' \right] = 0 \tag{11}$$

e então

$$f_{\vec{q}}^* = \frac{-\Gamma_{\vec{q}} G_{\vec{q}}}{\left(\hbar \omega + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2M_z} \right)}. \tag{12}$$

Voltando ao valor esperado de E temos :

$$E = \langle \psi | H_0 | \psi \rangle - \sum_{\vec{q}} \frac{|\Gamma_{\vec{q}}|^2 |G_{\vec{q}}|^2}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2M_z}}. \quad (13)$$

O primeiro termo já foi calculado no capítulo 1. O segundo termo é a contribuição da interação éxciton-fônon para a energia do estado ligado, E_{pol} , dado por

$$E_{pol} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{|\Gamma_{\vec{q}}|^2 |G_{\vec{q}}|^2}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q_z^2}{2M_z}}, \quad (14)$$

com $G_{\vec{q}}$ dado por

$$G_{\vec{q}} = \exp \left[- \left(\frac{Q_x^2}{4\alpha_z^2} + \frac{Q_y^2}{4\beta_e^2} + \frac{\gamma_h^2 q_z^2}{4\lambda} \right) \right] - \exp \left[- \left(\frac{Q_x^2}{4\alpha_h^2} + \frac{Q_y^2}{4\beta_h^2} + \frac{\gamma_e^2 q_z^2}{4\lambda} \right) \right]. \quad (15)$$

A expressão para E_{pol} em unidades de Rydberg efetivo é

$$\begin{aligned} E_{pol} = & \left(\frac{\hbar\omega}{R_y^*} \frac{M_z}{\mu_{0z}} \right) \left(\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} - 1 \right) \frac{1}{\pi} \cdot \int_0^\infty dt \\ & \left[\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{2\alpha_e^2} + t \right) \left(\frac{1}{2\beta_e^2} + t \right)}} \int_0^\infty dq_z \frac{e^{-q_z^2 \left(t + \frac{\gamma_h^2}{2\lambda} \right)}}{\left(\frac{\hbar\omega}{R_y^*} \frac{M_z}{\mu_{0z}} \right) + q_z^2} + \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{2\alpha_h^2} + t \right) \left(\frac{1}{2\beta_h^2} + t \right)}} \int_0^\infty dq_z \frac{e^{-q_z^2 \left(t + \frac{\gamma_e^2}{2\lambda} \right)}}{\left(\frac{\hbar\omega}{R_y^*} \frac{M_z}{\mu_{0z}} \right) + q_z^2} - \\ & \left. - \frac{2}{\sqrt{\left(\left(\frac{1}{4\alpha_e^2} + \frac{1}{4\alpha_h^2} \right) + t \right) \left(\left(\frac{1}{4\beta_e^2} + \frac{1}{4\beta_h^2} \right) + t \right)}} \int_0^\infty dq_z \frac{e^{-q_z^2 \left(t + \frac{1}{2\lambda} (\gamma_e^2 + \gamma_h^2) \right)}}{\left(\frac{\hbar\omega}{R_y^*} \frac{M_z}{\mu_{0z}} \right) + q_z^2} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

Para otimizar o cálculo numérico fizemos uso da seguinte identidade :

$$\int_0^\infty \frac{e^{-a^2 x^2}}{x^2 + b^2} dx = \operatorname{erfc}(ab) \frac{\pi}{2b} e^{a^2 b^2} \quad (17)$$

já que o lado direito desta expressão tem expansão polinomial conhecida ⁽⁴⁴⁾. $\operatorname{erfc}(x)$ é a função erro complementar.

A energia do estado de elétrons e buracos livres é obtida ignorando o termo de interação entre ambas as partículas, bem como ignorando seu movimento em z . O termo de interação com fônons é calculado da mesma maneira, a diferença está no termo $G_{\vec{q}}$ que é simplesmente :

$$G_{\vec{q}}^i = \exp \left[- \left(\frac{Q_x^2}{4\alpha_i^2} + \frac{Q_y^2}{4\beta_i^2} \right) \right] \quad i = e, h. \quad (18)$$

Subtraindo o valor da energia do estado ligado da energia do estado não ligado obtemos a energia de ligação com a inclusão da interação éxciton-fônon.

Analogamente ao que já fizemos no capítulo 1 podemos tomar o limite em que a massa do buraco vai a infinito. Recuperamos assim o resultado obtido por Osório et al para uma impureza no centro do fio com a inclusão do efeito polarônico. O efeito prático deste limite é substituir o termo $1/\epsilon_\infty$ por $1/\epsilon_0$. O termo que contém a interação elétron-fônon torna-se então

$$E'_{pol} = e^2 \frac{\alpha_e \beta_e \sqrt{\lambda}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_\infty} \right) \times \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{(1 + 2\alpha_e^2 t)(1 + 2\beta_e^2 t)(1 + 2\lambda t)}}, \quad (19)$$

idêntico ao obtido na ref. (35).

2.3. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Na discussão dos resultados a seguir os parâmetros correspondentes a cada situação estão descritos nas legendas do gráfico. Vamos essencialmente rever os resultados obtidos no capítulo 1 e compará-los com os resultados aqui obtidos. Assim quando for o caso, o comportamento das curvas devido à inclusão da interação com fônons será discutido.

2.3.1 ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM PERFIS RETANGULARES E INTERAÇÃO COM FÔNONS

Nas figuras (18-21) mostramos resultados para a energia de ligação análogos aos das figuras (5-8) levando em conta a interação com fônons. O comportamento observado é o mesmo. Uma comparação entre os dois casos, com e sem a interação com fônons, está mostrada nas figuras (22-25). O caso com fônons apresenta energias de ligação mais baixas, entretanto à medida que o confinamento é perdido e a energia de ligação diminui com a redução de L_y , a diferença entre os dois casos diminui. Este fato é mais perceptível quando as concentrações de Al são iguais a 0.15.

A inclusão da interação dos portadores com fônons reduz sua energia. Este fato é evidente a partir da expressão para a Hamiltoniana de interação. Ocorre então que ambas, a energia do estado ligado e do estado livre, são reduzidas. A energia de ligação pode, portanto, diminuir ou aumentar. O diagrama da figura (26) mostra uma situação particular.

No caso particular em que as massas dos portadores são iguais, temos

por simetria que as funções de onda do elétron e buraco no estado fundamental do éxciton devem ser iguais. Isto significa que os parâmetros variacionais do elétron e do buraco devem ser iguais. Independentemente dos valores dos parâmetros, o termo E_{pol} do estado ligado se anula (cf.eq.(16)). Isto é compreensível já que a polarização induzida pela carga positiva é cancelada por aquela produzida pela carga negativa. Esta situação foi testada em nosso programa e o valor obtido para o termo E_{pol} foi $1e-19$ meV.

2.3.2 ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM PERFIS QUADRADOS E INTERAÇÃO COM FÔNONS

Nas figuras (27,28) mostramos resultados para a energia de ligação análogos aos das figuras (11,12) para o caso de perfis quadrados. Uma comparação entre os resultados com e sem a interação com fônons é mostrada nas figuras (29,30). A interação com fônons produz, como se espera, um comportamento análogo ao obtido no caso anterior, quando L_x era mantido constante.

2.3.3 ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM ÁREA CONSTANTE E INTERAÇÃO COM FÔNONS

Os resultados mais interessantes estão mostrados nas figuras (31,32). Observamos uma inversão na influência da interação com fônons sobre a energia de ligação. Nos resultados que mostramos até este momento a interação reduz a energia de ligação, resultado este que é contrário ao observado por Matsuura para éxcitons

em poços quânticos de GaAs e por Das Sarma para impurezas hidrogenoides bidimensionais. Observamos contudo, nos gráficos das figuras (31,32), que a influência da interação com fônons tem seu "sinal" invertido. Para fios altamente anisotrópicos (no sentido geométrico), com $L_x \gg L_y$, a interação com fônons aumenta a energia de ligação. Neste limite, em que o fio se assemelha a um poço quântico, recuperamos o comportamento obtido por Matsuura.

Os resultados que mostramos aqui podem ser compreendidos com uma argumentação baseada no fato de que a interação com fônons é essencialmente um fenômeno de polarização da rede por partículas carregadas, e que seu valor é tanto maior, em módulo, quanto maior a polarização total induzida pelas partículas.

Nós já vimos que para o caso em que as massas de elétron e buraco são iguais a polarização é nula. Outra situação onde a polarização total é praticamente nula ocorre quando ambas as partículas estão confinadas por barreiras infinitas numa caixa. (Devemos aqui supor que a separação entre as subbandas de confinamento é muito maior que o Rydberg efetivo). Se relaxamos essa condição, por exemplo, permitindo um grau de liberdade, o estado ligado entre elétron e buraco sofre uma correção polarônica não nula. Um aumento maior nos graus de liberdade do sistema levam a uma correção todavia maior.

Estas considerações não devem ser extrapoladas sem cuidado. A energia de ligação depende também da energia do estado livre, cuja correção polarônica tem sua dependência característica. No caso específico das figuras (31,32) a argumentação acima é satisfatória.

O efeito mais acentuado no caso do LHE que no HHE é causado pela diferença de massas na direção x (que é a direção quase- livre). A massa do lh é maior que a do hh na direção x .

FIGURA 18

FIGURA 19

figura 18 - Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 19 - Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

FIGURA 20

FIGURA 21

figura 20 – Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 21 – Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da largura L_y do fio com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å, 150Å e 200Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

FIGURA 22

FIGURA 23

figura 22 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50 Å, 100 Å e 150 Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 23 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50 Å, 100 Å e 150 Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

FIGURA 24

FIGURA 25

figura 25 - Comparação entre a energia de ligação de excitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å e 150Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 24 - Comparação entre a energia de ligação de excitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio. Os valores utilizados para a largura L_x são 50Å, 100Å e 150Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.15,.15).

figura 26 – (a) Diagrama de energias mostrando o deslocamento dos níveis devido a inclusão da interação com fônons. (b) Energia de ligação do éxciton como função da largura L de um poço quântico com concentração de Al igual a 0.3 (FPB) e barreiras infinitas (IPB). As curvas solidas e tracejadas mostram resultados com e sem a inclusão da interação com fônons. Curvas tracejadas com pontos mostram o resultado obtido com a utilização da constante dieletrica optica.

FIGURA 27

FIGURA 28

figura 27 – Energia de ligação de éxcitons leves (LHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

figura 28 – Energia de ligação de éxcitons pesados (HHE) como função da aresta L do fio com perfil quadrado com a inclusão da interação com fônons. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são: (.3,.3), (.1,.3) e (.3,.1) para as curvas 1, 2 e 3.

FIGURA 29

FIGURA 30

figura 29 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são $(.3,.3)$, $(.1,.3)$ e $(.3,.1)$ para as curvas 1, 2 e 3.

figura 30 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da aresta L do fio com perfil quadrado. Os valores utilizados para as concentrações de Al nas regiões 1 e 2 são $(.3,.3)$, $(.1,.3)$ e $(.3,.1)$ para as curvas 1, 2 e 3.

FIGURA 32

FIGURA 31

figura 31 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons pesados (HHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 20.0000Å, 30.000Å e 40.000Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

figura 32 - Comparação entre a energia de ligação de éxcitons leves (LHE), com e sem a interação com fônons, como função da largura L_y do fio para fios com área constante. Os valores utilizados para a área do fio são 20.0000Å, 30.000Å e 40.000Å. As concentrações de Al utilizadas nas regiões 1 e 2 são (.3,.3).

CAPÍTULO 3

3. CONCLUSÃO

3.1 ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS

Obtivemos resultados para a energia de ligação de éxcitons em fios quânticos com seção transversal retangular. Esses resultados foram obtidos através de um cálculo variacional onde utilizamos uma função tentativa simples, uma gaussiana. Essa função tentativa foi utilizada em um cálculo semelhante por Osório *et al* na determinação da energia de ligação de impurezas em fios quânticos. Os resultados obtidos por Osório *et al* fornecem resultados próximos aos obtidos com cálculos mais sofisticados (Brum ⁽⁴⁵⁾), principalmente para fios finos.

Nossos resultados são compatíveis com resultados obtidos para poços quânticos de dimensões comparáveis, sobre os quais há uma extensa bibliografia.

Observamos, como previsto na literatura, um aumento substancial na energia de ligação do éxciton devido ao confinamento adicional.

Uma análise do método variacional com a utilização de uma função de onda gaussiana para o poço quântico foi feita no apêndice A, onde também determinaremos a energia do estado ligado do éxciton.

Os resultados obtidos para fios quânticos com seção transversal quadrada são compatíveis com resultados obtidos para fios com seção transversal circular (Brown e Spector ⁽³⁶⁾), no sentido de que a dependência com a dimensão da estrutura (o raio ou lado do fio) é a mesma. Uma comparação quantitativa não pode ser feita ainda pois os parâmetros do material são distintos.

Comparamos nossos resultados com os obtidos por Degani e Hipólito para um perfil quadrado e barreiras finitas, onde foi utilizado uma solução tipo soma de dois poços. Os resultados são quantitativamente muito semelhantes exceto

pelo comportamento do nosso resultado que mostrou um cruzamento entre 2 curvas. Esse comportamento foi explicado e a diferença sugere uma melhor versatilidade da função de onda escolhida, que se ajusta no fio, considerando a interação elétron-buraco.

Obtivemos resultados para perfis retangulares e potenciais de confinamento distintos. Esses resultados indicam um crescimento da energia de ligação do éxciton para qualquer geometria do fio com o aumento do potencial de confinamento. Esta tendência concorda com o resultado obtido com barreiras infinitas por Degani e Hipólito.

Analizamos a dependência da energia de ligação com a forma da seção retangular para fios com área constante. Os resultados, obtidos para fios com áreas entre $10.000 \text{ \AA}^2$ e $40.000 \text{ \AA}^2$, mostram que a energia de ligação depende da forma da seção. A energia de ligação tem um máximo quando o perfil do fio é simétrico (quadrado, exceto devido a anisotropia das massas e potencial). O comportamento observado para fios com áreas maiores foi estudado em um fio com área $60.000 \text{ \AA}^2$ e foi explicado em termos das "dimensões" das funções de onda eletrônica e de buraco.

As conclusões para o capítulo 1, resumidas acima, foram analisadas satisfatoriamente em termos do comportamento da função de onda das partículas com os parâmetros do sistema as massas e barreiras de potencial.

3.2 ÉXCITONS EM FIOS QUÂNTICOS COM INTERAÇÃO COM FÔNONS

Introduzimos o efeito da interação com fônons para um éxciton no fio quântico estudado no capítulo 1, o que foi possível devido a forma simples escolhida para a função de onda.

A influência da interação éxciton-fônon no fio quântico foi estudada nas mesmas condições em que determinamos as energias de ligação de éxcitons no capítulo 1. O efeito da interação foi essencialmente o de reduzir a energia de ligação.

O efeito da interação éxciton-fônon, se inverte quando as dimensões se aproximam daquelas de poços quânticos. A interação com fônons nesse caso aumenta a energia de ligação, recuperando o comportamento observado para poços quânticos.

O efeito da interação de éxcitons com fônons em estruturas que apresentem confinamento, foi analisado em termos da polarização total induzida na rede cristalina. Essa análise é capaz de explicar o comportamento observado para o efeito da interação elétron-buraco-fônon na energia do estado ligado. A partir daí tiramos conclusões sobre a energia de ligação do éxciton supondo que o efeito da interação com fônons sobre a energia do par desligado não tenha um comportamento anômalo.

A análise apresentada aqui explica o comportamento observado nos nossos cálculos, para a energia de ligação de éxcitons em heteroestruturas semicondutoras, tanto de éxcitons leves (LHE) como pesados (HHE) e as diferenças entre ambos.

APÊNDICE A

A.1. ENERGIA DE UMA PARTÍCULA EM UM POÇO QUÂNTICO

Vamos considerar partículas com massa constante em todo o espaço. A Hamiltoniana de uma partícula em um poço quântico é:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (A.1)$$

onde as energias são dadas em R_y^* e os comprimentos a_0^* . O potencial de confinamento $V(x)$ é definido como:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < L/2 \\ V & |x| \geq L/2. \end{cases} \quad (A.2)$$

A.1.1. SOLUÇÃO EXATA

A solução exata é obtida simplesmente considerando as condições de contorno aplicadas, na interface, à função de onda nos três trechos. A função de onda pode ser encontrada em livros textos de Mecânica Quântica. A energia que do estado fundamental é obtida resolvendo a equação algébrica

$$\sqrt{E} \tan(\sqrt{E} \cdot L/2) = \sqrt{V - E} \quad (A.3)$$

A.1.2. SOLUÇÃO POR MÉTODO VARIACIONAL E FUNÇÃO DE ONDA GAUSSIANA

Propomos uma função de onda gaussiana,

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \quad (A.4)$$

O valor esperado da Hamiltoniana é

$$E = \frac{\alpha^2}{2} + V \operatorname{erfc}(\alpha L/2). \quad (A.5)$$

Este valor deve ser minimizado com relação a α , ou seja devemos obter α' , tal que $\frac{dE}{d\alpha}|_{\alpha'} = 0$.

O valor do parâmetro α é obtido resolvendo a equação algébrica

$$\ln \left(\frac{\sqrt{\pi}}{VL} \alpha \right) = -\alpha^2 \left(\frac{L}{2} \right)^2. \quad (A.6)$$

A energia é obtida substituindo este valor em (A.5).

A.1.3. RESULTADOS

Resolvemos numericamente as equações (A.6) e (A.3) para alguns valores de L . Notamos que a diferença entre os valores obtidos para a energia variam

entre 1 e 10 por cento aproximadamente, para valores de L entre 0.2 e 1.6 a_0^* . O comportamento da curva $E \times L$ é o mesmo, porém a diferença não é constante.

A.2. ENERGIA DO ESTADO LIGADO DE UM ÉXCITON EM UM POÇO QUÂNTICO

Para efeito de comparação, consideramos um éxciton formado de um elétron e um buraco confinados por uma barreira de igual valor. Consideramos também massas iguais. A Hamiltoniana deste sistema é então:

$$H = -\frac{d^2}{dx_e^2} - \frac{d^2}{dx_h^2} + V_e(x_e) + V_h(x_h) - \frac{2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} - \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \quad (A.7)$$

A.2.1. FUNÇÃO DE ONDA HIDROGENÓIDE BIDIMENSIONAL E FUNÇÃO DE SUBBANDA GAUSSIANA

Propomos uma função de onda tentativa,

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \left(\frac{\delta^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha_e \alpha_h}{\pi} e^{-\frac{1}{2}(\alpha_e^2 x_e^2 + \alpha_h^2 x_h^2)} e^{-\frac{\rho}{\delta}} \quad (A.8)$$

Obtemos para a energia a expressão

$$E = \frac{\alpha_e^2}{2} + \frac{\alpha_h^2}{2} + \frac{\delta^2}{2} + V_e \operatorname{erfc}(x_e) + V_h \operatorname{erfc}(x_h) -$$

$$-2\alpha_e \alpha_h \frac{\delta^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t(\alpha_e^2 \alpha_h^2 + t(\alpha_e^2 + \alpha_h^2))}} \left[\frac{1}{2t} - \frac{\delta}{4t} \sqrt{\frac{\pi}{t}} \left(e^{\delta^2/4t} \operatorname{erfc}\left(\frac{\delta}{2\sqrt{t}}\right) \right) \right] \quad (A.9)$$

que deve ser minimizada com relação a α_e , α_h e δ .

A.2.2. FUNÇÃO DE ONDA GAUSSIANA BIDIMENSIONAL E FUNÇÃO DE SUBBANDA GAUSSIANA

Propomos uma função variacional,

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \left(\frac{\alpha_e \alpha_h \lambda^2}{\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha_e^2 x_e^2 + \alpha_h^2 x_h^2)} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 \rho^2} \quad (A.10)$$

Obtemos para a energia a expressão

$$E = \alpha_e^2 + \alpha_h^2 + \lambda^2 + V_e \operatorname{erfc}(x_e) + V_h \operatorname{erfc}(x_h) -$$

$$-4 \frac{\alpha_e \alpha_h}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\alpha_e^2 \alpha_h^2 + t^2(\alpha_e^2 + \alpha_h^2)}} \frac{1}{(1 + (\frac{t}{\lambda})^2)} \quad (A.11)$$

que é minimizada com relação a α_e , α_h e λ .

A.2.3. RESULTADOS

Observamos que a energia do estado ligado fundamental obtida como função de onda hidrogenóide bidimensional foi sempre maior que aquela obtida com

a função gaussiana. Parece razoável supor que isto independe da escolha exata das funções de onda ao longo de x . Supomos então, que no caso do fio, uma função tentativa gaussiana também seja melhor que uma função tentativa hidrogenóide unidimensional.

A.3. CONCLUSÃO

A energia da subbanda obtida na parte (A.1) com uma função gaussiana foi maior que a solução exata, naturalmente. Como não conhecemos o comportamento da energia do estado ligado fundamental verdadeiro e a energia de subbanda foi calculada variacionalmente, não podemos afirmar se o comportamento quantitativo que obtivemos para a energia de ligação no fio quântico, que é a diferença entre esses dois valores, subestimado ou superestimado. Os comportamentos qualitativos obtidos, contudo, são válidos.

REFERÊNCIAS

1. R. Dingle, W. Wiegman e C. H. Henry, Phys. Rev. Lett. 33, 827(1974)
2. D. S. Chemla, D. A. B. Miller, J. Opt. Soc. Am. B2,1155(1985)
3. D. A. B. Miller, D. S. Chemla, P. W. Smith, A. C. Gossard e W. T. Tsang, Appl. Phys. B28,(1982)96
4. D. A. B. Miller, Surf. Sci. 174,221(1986)
5. D. R. P. Guy, N. Apsley, L. L. Taylor, S. J. Bass e P. C. Klipstein, SPIE Proc, 792,189(1987)
6. A. Baldereschi e N. O. Lipari, Phys. Rev. B3,439(1971)
7. J. M. Luttinger, Phys. Rev. 102,1030(1956)
8. R. C. Miller e D. A. Kleinman, J. Lumin. 30, 520(1985)
9. R. Greene e K. K. Bajaj, Phys. Rev. B29, 1807(1984)
10. R. C. Miller, D. A. Kleinman, A. C. Gossard e W. T. Tsang, Phys. Rev. B25,3871(1982)
11. D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon e K. Woodbridge, Phys. Rev. B34, 4002(1986)
12. O. Akimoto e H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn. 22, 181(1967)
13. S. R. Eric Yang, L. J. Sham, Phys. Rev. Lett., 58, 2598(1987)
14. S. R. Eric Yang, D. A. Broido e L. J. Sham, Phys. Rev. B32, 6630(1985)
15. U. Ekemberg e M. Altarelli, Phys. Rev. B35, 7585(1987)

16. B. A. Mason e S. Das Sarma, Phys. Rev B33, 8379(1986)
17. A. Ercelbi e U. Ozdincer, Sol. Stat. Comm., 57, 441(1986)
18. A. Ercelbi e U. Ozdincer J. Phys. Condens. Matter, 1, 1999(1989)
19. M. H. Degani e O. Hipolito, Semic. Sci. Technol., 2, 578(1987)
20. M. H. Degani e O. Hipolito, Phys. Rev. B35, 9345(1987)
21. M. Matsuura, Phys. Rev B37, 6977(1988)
22. K. J. Nash e D. J. Mowbray, J. Lumin. 44, 315(1989)
23. S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 52, 859(1984)
24. X. Wu, F. M. Peeters e J. T. Devreese, Phys. Stat. Sol. 143, 591(1987)
25. J. C. Portal J. Phys C16, L573(1983)
26. M. A. Brummell, Phys. Rev. Lett. 62(1989)
27. J. Shah, A. Pinczuk, A. C. Gossard e W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. 54, 2045 (1985)
28. J. K. Jain e S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 62, 2305(1989)
29. V. J. Goldman, D. C. Tsui e J. E. Cunningham, Phys. Rev. B36,7635(1987)
30. N. S. Wingreen, K. W. Jacobsen e J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett.61, 1396(1988)
31. W. Ossau, B. Jakel, E. Bangert, G. Landwer e G. Wiegman, Surf. Sci. 174,188(1986)
32. K. Kash, A. Scherer, J. M. Worlock, H. G. Craighead e M. C. Tamargo, App. Phys. Lett. 49, 1043(1986)
33. J. Cibert, P. M. Petroff, Appl. Phys. Lett. 49, 1275(1986)

34. E. Kapon, M. C. Tamargo e H. C. Hwang, Appl. Phys. Lett. 52, 607(1988)
35. F. A. P. Osorio, Dissertação de Mestrado
36. J. Brown e H. N. Spector, Phys. Rev. B35, 3009(1987)
37. M. H. Degani e O. Hipolito, J. Phys. Coll. 48, 223(1987)
38. D. Gershoni, H. Temkin, G. J. Dolan, J. Dunsmuire, S. N. G. Chu e M. B. Panish, Appl. Phys. Lett. 53, 995(1988)
39. G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang e L. Esaki, Phys. Rev. B26, 1974(1982)
40. J. Polmann e H. Buttner, Phys. Rev. B16, 4480(1977) e referências contidas
41. M. Kohl, D. Heitmann, P. Grambow, e K. Ploog, 63, 2124 (1989)
42. H. Frohlich. Polarons and Excitons (1962) Scottish Universities Summer School, (Kuper, Whitfield)
43. D. Pines. Polarons and Excitons.
44. Hand Book of Mathematical Functions, (1964), (Ed. M. Abramowitz)
45. J. A. Brum, Soli. State Comm.54, 179 (1985)