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

Magnetopolarons em Heteroestruturas
Semicondutoras de Baixa Dimensiona-
lidade.

Francisco Aparecido Pinto Osório

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

Orientador: Prof.Dr.Oscar Hipólito

São Carlos - São Paulo
1992

133

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE FRANCISCO APARECIDO PINTO OSORIO APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 22/12/1992

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Hidalgo

Prof. Dr. Lúcio Citranoulo Ioriatti Junior

Prof. Dr. Marcos Henrique Vagan

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques

Prof. Dr. José Roberto Leite

Dedico este trabalho

à minha esposa Diva,

`a minha filha Aline

e ao meu filho André.

Agradecimentos

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

Ao prof. Dr. Oscar Hipólito pela orientação, apoio e confiança.

Aos colegas professores do Departamento de Física da Universidade Federal de Goiás pelo incentivo e confiança.

Ao prof. Dr. Antonio Carlos Faria pelo auxílio na área computacional e incentivo.

Ao prof. Dr. Marcos H. Degani pelas discussões produtivas e incentivo.

Agradeço também à Capes, ao CNPq e à Universidade Federal de Goiás, pelo suporte financeiro que foram essenciais para a elaboração deste trabalho.

ÍNDICE

Resumo

Abstract

Capítulo 0 : Introdução	1
Capítulo 1 : Magnetopolaron ligado à uma impureza hidrogenóide em um poço quântico de GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	5
1.1 Introdução.	6
1.2 Teoria.	8
1.2.1 Cálculo das energias dos níveis $1s, 2p_-$ e $2p_+$ do sistema não perturbado ($\alpha=0$)	10
1.2.2 Efeito polarônico sobre os níveis do doador.	13
1.3 Comparação com os resultados experimentais.	22
Capítulo 2 : Efeito da interação elétron—fonon sobre a massa ciclotrônica de elétrons confinados em fios quânticos.	27
2.1 Introdução	30
2.2 Cálculo do deslocamento da energia dos níveis de Landau devido ao efeito polarônico	33
2.2.1 Campo magnético fraco	36
2.2.2 Campo magnético forte	45
2.2.3 Região ressonante.	46

2.3 Conclusão	53
Capítulo 3 : Ressonância Ciclotrônica de polarons interfaciais em heterojunções de materiais semicondutores.	55
3.1 Introdução	56
3.2 Desenvolvimento Teórico	58
3.3 Resultados	67
Capítulo 4 : Efeito do campo magnético sobre a energia de ligação do estado fundamental de um elétron ligado a uma impureza hidrogenóide em um ponto quântico circular de GaAs-AlGaAs.	75
4.1 Introdução	76
4.2 Modelo teórico	78
4.2.1 Campo magnético nulo: Solução exata	80
4.2.2 Solução com campo magnético aplicado. Método variacional	87
Referências	96

RESUMO

Nós calculamos o efeito da interação elétron-fonons longitudinais óticos (LO) sobre a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ entre os níveis de uma impureza doadora, localizada em um poço quântico de GaAs-Al_xGa_{1-x}As. Nossos resultados para a energia de transição em função do campo magnético aplicado, mostram claramente, que a saturação da energia de transição (efeito pinning) ocorre na energia dos fonons LO, em boa concordância com recentes dados experimentais. Obtemos também a massa de cíclotron de polarons confinados em fios quânticos quase-unidimensionais, com potencial de confinamento parabólico. Observamos que o comportamento da massa é diferente daquele para sistemas bi-dimensionais e que esta diferença é maior quanto maior o potencial de confinamento.

Para a heterojunção de GaAs-AlGaAs e GaAs-GaSb, investigamos a importância da interação elétron-fonons interfaciais sobre a massa de cíclotron. Verificamos, que a contribuição dos fonons interfaciais é fundamental nas regiões próximas às resonâncias, onde domina o espectro. Finalmente, calculamos a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide, localizada no centro de um ponto quântico circular de GaAs-AlGaAs. Na ausência de campo magnético aplicado, obtivemos uma expressão analítica para a função de onda do elétron ligado. Notamos, que a influência do campo magnético sobre a energia de ligação é fraca nas regiões de pequenos raios, devido ao forte potencial de confinamento.

ABSTRACT

We calculate the effects of the electron-longitudinal optical (LO) phonons interaction on the intra donor $1s \rightarrow 2p_+$ transition energy in GaAs-AlGaAs quantum wells structures. Our results to the transition energy as a function of the magnetic field strength, show that the pinning effect occur in the phonon LO energy in good agreement with recent experimental data. The cyclotron mass of polarons confined in quasi-one-dimensional quantum-well-wires, with parabolic confinement potential, is also obtained. The behavior of electrons effective mass with magnetic field is different, of the two-dimensional systems, and the difference increase when the confinement potential increase.

To heterojunctions of GaAs-AlAs and GaAs-GaSb, we investigate the electron-interfacial optical (IO) phonons interactions on the effective cyclotron mass. We find that the electron-IO-phonons interaction is fundamental near the resonances, where they dominate the spectra. Finally, the ground state binding energy of donor impurity, placed in the center of a circular quantum dot is calculated. Without magnetic field, we obtained the analytic expression to the bound electron wave function. The influence of the magnetic field on the donor binding energy is more weak, when the radius of the quantum dot became smaller.

Introdução

Com o desenvolvimento nos últimos anos de sofisticadas técnicas de crescimento de cristais, como Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e Deposição de Vapor Químico Organometálico (MOCVD), tornou-se possível a fabricação de heteroestruturas compostas de camadas alternadas de dois materiais semicondutores, com grande controle sobre a espessura das camadas e interfaces abruptas entre os materiais. Tais estruturas incluem heterojunções, poços quânticos e super-redes semicondutoras. A fabricação de super-redes foi proposta pela primeira vez por Esaki e Tsu [1] em 1969, para a obtenção de efeitos de resistência diferencial negativa.

Um dos principais requisitos para a produção de heteroestruturas de alta qualidade com interfaces abruptas e livres de defeitos é que as constantes de rede dos materiais envolvidos, sejam aproximadamente iguais. Esse requisito é muito bem satisfeito pelas heteroestruturas compostas por GaAs e pela liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, onde x é a concentração de alumínio, nesse caso a variação do parâmetro de rede ($\Delta a/a$) é da ordem de 0.06% onde $a=5,6$ angstroms é o parâmetro de rede do GaAs. Por este motivo as estruturas compostas desses materiais são as mais estudadas dentre todas, tanto do ponto de vista teórico como experimental.

Além do mais tanto o GaAs como o AlGaAs possuem "gaps" diretos, sendo que a energia de "gap" do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $E_g = (1,52 + 1,155x + 0,37x^2)$ eV [2] é maior que a do GaAs ($E_g=1,52$ eV). Este fato provoca descontinuidades nas bandas de valência (BV) e condução (BC) na interface e estas descontinuidades comandam todas as propriedades eletrônicas dessas heteroestruturas. Experimentalmente [3] observa-se que a descontinuidade da energia do "gap" distribue-se entre as bandas de condução e valência nas proporções de 60% e 40% respectivamente.

Embora o número de impurezas seja extremamente reduzido muitas vezes dopa-se propositalmente estas estruturas. Se em uma heterojunção de GaAs-AlGaAs, o

AlGaAs, material de “gap” maior, é dopado com impurezas doadoras, enquanto o GaAs é mantido puro (dopagem modulada), os elétrons cedidos pelas impurezas irão se alojar no GaAs, material com “gap” menor, ficando aí confinados por um poço de potencial unidimensional perto da interface entre os semicondutores. Este poço de potencial é originado pela diferença de “gap” entre os dois materiais e pelas impurezas doadoras.

O gás de elétrons assim formado é dito ser dinamicamente bidimensional já que o movimento eletrônico é livre nas direções paralelas à interface da heterojunção e quantizado em subbandas na direção perpendicular, pela presença do poço de potencial. Devido à separação espacial entre as impurezas ionizadas e os elétrons há uma supressão do espalhamento elástico e essas estruturas exibem altas mobilidades eletrônicas a baixas temperaturas ($5 \cdot 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$). Pelo mesmo processo de dopagem modulada nós podemos ter também o gás de elétrons quase-bidimensionais (GEQ2D) presente em poços quânticos e super-redes.

Agora se em vez de dopar-se o material da barreira dopar-se o GaAs, por exemplo de uma estrutura de poços quânticos, então o confinamento espacial irá beneficiar em muito a interação coulombiana elétron-impureza [4] originando energias de ligação mais altas que as encontradas no volume (bulk) do semicondutor.

Os materiais dos grupos III-V e II-VI da tabela periódica, que são os mais utilizados para a fabricação de heteroestruturas, são polares. E em semicondutores polares o movimento eletrônico é acompanhado do campo de polarização dos fonons óticos formando a quase partícula chamada de polaron. Esta interação elétron-fonons óticos diminui a energia do elétron de uma quantidade correspondente à energia de ligação do polaron e provoca uma renormalização de sua massa efetiva. Experimentalmente observa-se, de experimentos de ressonância ciclotrônica, que os efeitos polarônicos em heteroestruturas de GaAs-AlGaAs são mais fracos que no volume do GaAs. Existem muitas outras propriedades dos sistemas quase-

bidimensionais que são bem diferentes daquelas para o volume do semiconductor [5,6].

Nos anos mais recentes com o avanço nas técnicas de nanolitografia e corrosão química, surgiram novas variedades de heteroestruturas, onde os elétrons são confinados em duas ou três dimensões. Essas estruturas são fabricadas a partir de estruturas bidimensionais crescidas por MBE. Confinando o elétron em duas dimensões temos os chamados fios quânticos [7] (quantum well wires), que comportam um gás de elétrons quase-unidimensionais, temos também os pontos quânticos [8] (quantum dots) que são similares a átomos artificiais, onde o movimento do elétron quase-zero-dimensional é confinado em todas as direções.

Como vimos as propriedades eletrônicas das estruturas bidimensionais já eram diferentes daquelas do volume (3D) do semiconductor é de se esperar que para estas novas estruturas as diferenças nas propriedades sejam ainda maiores. Com o aumento do confinamento eletrônico a energia de ligação de impurezas doadoras deve crescer bastante [9]. Também a mobilidade eletrônica em fios quânticos deve ser beneficiada pelo confinamento adicional [10].

Neste trabalho nós estudamos nos três primeiros capítulos o efeito da interação elétron-fonons óticos sobre as propriedades de elétrons (livres ou ligados) confinados em diferentes heteroestruturas semicondutoras, submetidas a um campo magnético uniforme. No primeiro capítulo consideramos a presença de uma impureza doadora hidrogenóide dentro de um poço quântico de GaAs-AlGaAs e investigamos os efeitos polarônicos sobre a energia de transição entre os níveis da impureza $1s \rightarrow 2p_+$. No segundo capítulo investigamos a massa ciclotrônica de polarons, presentes em fios quânticos quase-unidimensionais de GaAs e InSb com potenciais de confinamento parabólicos, nas regiões de campos fracos, fortes e ressonantes. Nesses dois capítulos consideramos somente a interação do elétron com os fonons longitudinais óticos (LO) do volume do semiconductor, via hamiltoniana de Fröhlich.

O efeito do acoplamento elétron-fonons interfaciais sobre a massa ciclotrônica de

elétrons presentes em heterojunções de GaAs-AlAs e GaAs-GaSb, é considerado no capítulo três, onde avaliamos o erro de se considerar apenas a interação elétron-fonons LO do volume do GaAs via hamiltoniana de Fröhlich.

No capítulo quatro obtemos a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide localizada no centro de um ponto quântico circular de GaAs-AlGaAs. Na ausência de campo magnético aplicado obtemos as formas analíticas das funções de onda do elétron ligado. E os efeitos do campo magnético sobre a energia de ligação são considerados através do método variacional. Cada um dos capítulos traz uma introdução mais específica do assunto nele tratado, de modo a localizar o problema dentro de um contexto mais geral, seguida do desenvolvimento dos cálculos e da análise dos resultados obtidos.

CAPÍTULO 1

MAGNETOPOLARON LIGADO A UMA IMPUREZA HIDROGENÓIDE EM UM POÇO

QUÂNTICO DE GaAs-Al_xGa_{1-x}As

1.1 Introdução

Nos últimos anos houve um notável crescimento na investigação das propriedades de elétrons confinados e acoplados a fonons longitudinais óticos (LO). Tais sistemas incluem gás de elétrons em poços quânticos e heterojunções de GaAs-AlGaAs [11]. Nestes materiais a interação elétron-fonons LO tem sido estudada teoricamente [12-20] e observada experimentalmente por vários autores [21-24].

Experimentos de Ressonância Ciclotrônica (RC) têm mostrado que os efeitos polarônicos em heteroestruturas são reduzidos quando comparados com o caso tridimensional (3D), em contradição com os cálculos para o caso do polaron estritamente bidimensional (2D) onde se tem um aumento substancial destes efeitos. No entanto, quando incluímos nos cálculos a natureza quase-bidimensional (Q2D) do gás de elétrons, bem como a blindagem dos portadores livres, a interação elétron-fonons LO é reduzida para valores menores do que aqueles do semiconductor tridimensional (3D).

Desde que a blindagem da interação elétron-fonons LO pelos elétrons livres desempenha um papel fundamental na redução dos efeitos polarônicos S.Huant e co-autores [25] e Y. H. Chang e co-autores [26] propuseram estudar magnetopolarons ressonantes em sistemas de baixa densidade eletrônica. Eles apresentaram medidas obtidas de experimentos de magneto-óptica da energia de transição entre os níveis $1s \rightarrow 2p_+$ de uma impureza doadora, localizada em estruturas de múltiplos poços quânticos dopados. Os principais resultados desses experimentos são conflitantes.

Chang e co-autores observaram a propriedade “pinning” do polaron ressonante, para uma impureza localizada no centro do poço quântico, numa energia bem abaixo daquela dos fonons LO e TO (transversais óticos) do centro da zona. Este surpreendente resultado foi combatido por Huant e Martinez [27], que o atribuíram a um artefato dielétrico e não devido à interação elétron-fonons. Já, nos experimentos de

Huant e co-autores foi observado um claro “pinning” da energia de transição na energia dos fonons LO do volume (bulk) do GaAs. Além disso eles também verificaram que a magnitude da interação elétron-fonons depende da posição da impureza no poço.

Na época em que esses experimentos foram realizados, não havia nenhum cálculo teórico publicado na literatura que tratasse dos efeitos do magnetopolaron ressonante sobre as propriedades de doadores em sistemas eletrônicos confinados. Nosso trabalho [28-30] foi então o primeiro cálculo teórico para investigar os efeitos da interação elétron-fonons LO sobre a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ de um elétron ligado à uma impureza hidrogenóide presente em um poço quântico de GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Para a obtenção da energia de transição, nós seguimos o seguinte procedimento: primeiramente usando o método variacional calculamos as energias dos níveis $1s$, $2p_+$ e $2p_-$ da impureza doadora associadas à subbanda mais baixa do poço quântico. A função de onda tentativa variacional que usamos tem a forma gaussiana e foi escolhida com muito cuidado. A correção polarônica a estas energias é calculada através da teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT), de uma forma modificada por Cohn, Larsen e Lax (CLL) [31]. Nossos resultados, para a impureza no centro do poço, estão em boa concordância com os resultados experimentais de Huant e co-autores, e reforçam o fato observado por eles, de que a propriedade “pinning” do polaron ressonante sobre a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ se dá quando a separação dos níveis for igual à energia dos fonons LO do GaAs.

Este capítulo é organizado da seguinte forma: na seção 1.2 apresentamos o cálculo da energia dos níveis da impureza seguindo o método variacional e discutimos a validade da função de onda tentativa escolhida. Na seção 1.2.2 generalizamos a teoria de perturbação de CLL para um sistema quase-bidimensional, e obtemos assim o deslocamento da energia do elétron devido ao acoplamento elétron-fonons LO. Finalmente na seção 1.3 comparamos nossos resultados com os resultados experimentais de Huant e co-autores [25].

1.2 Teoria

A um poço quântico de GaAs-Al_xGa_{1-x}As contendo em seu interior uma impureza doadora hidrogenóide, aplica-se um campo magnético uniforme, $\vec{B}$, na direção perpendicular à interface entre os dois materiais, tomada como sendo a direção z. A Hamiltoniana de um elétron ligado a esta impureza localizada na posição (0,0,z₁) e interagindo com os fonons longitudinais óticos (LO) do volume (bulk) do GaAs, na aproximação de massa efetiva, tem a seguinte forma:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (1.1)$$

sendo H_0 a Hamiltoniana de um elétron no poço quântico interagindo com a impureza doadora na presença do campo magnético, H_1 representa a energia cinética dos fonons e H_2 é a Hamiltoniana de Fröhlich, que descreve a interação elétron-fonons LO. Em unidades polarônicas, onde as energias são medidas em unidades de $\hbar W_{LO}$, onde W_{LO} é a frequência dos fonons longitudinais óticos de longo comprimento de onda e os comprimentos em unidades do raio do polaron $r_p = (\hbar/2m_1 W_{LO})^{1/2}$, sendo m_1 a massa de banda do elétron no GaAs, podemos escrever

$$H_0 = -\nabla^2 - \frac{2}{r} R_p^{1/2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \gamma L_z + V(z) \quad (1.2)$$

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}} \quad (1.3)$$

$$H_2 = \sum_{\vec{k}} (V_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}} + V_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}}^{\dagger}) \quad (1.4)$$

onde $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2\hbar W_{LO}}$, com $\omega_c = eB/m_1c$ a frequência de ciclotron e $R_p = R_y^* / \hbar W_{LO}$, sendo $R_y^* = 5.83$ meV o Rydberg efetivo para o GaAs. Ainda na equação (1.2), L_z é a componente z do operador momento angular em unidades de $\hbar$, $r = [\rho^2 + (z-z_I)^2]^{1/2}$ é a distância que separa o elétron da impureza e ϵ_0 a constante dielétrica estática do GaAs. Os operadores criação e aniquilação dos fonons LO, de vetor de onda $\vec{k} = (K, k_z)$, são denotados por $b_{\vec{k}}^+$ e $b_{\vec{k}}$ respectivamente e o potencial de interação elétron-fonons é

$$V_{\vec{k}} = - \frac{i}{|\vec{k}|} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad (1.5)$$

onde α é a constante de acoplamento elétron-fonons LO de Fröhlich ($\alpha=0.07$ para o GaAs) e V o volume de normalização.

O potencial de confinamento do elétron no poço quântico é definido como,

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & |z| > L/2 \\ 0 & |z| < L/2 \end{cases} \quad (1.6)$$

onde a altura das barreiras de potencial V_0 é obtida em termos da concentração x de Al na liga de $Al_xGa_{1-x}As$, através da expressão:

$$V_0 = \frac{0.60}{\hbar W_{LO}} (1040 x + 470 x^2) \quad (1.7)$$

Para calcularmos a energia do elétron associada ao estado fundamental ($1s$) e aos estados excitados ($2p_-$ e $2p_+$) da primeira subbanda elétrica dos níveis da impureza nós tratamos H_2 como uma perturbação em relação a $(H_0 + H_1)$. E através do método variacional obtemos os autovalores e autofunções de H_0 .

1.2.1 Cálculo das energias dos níveis 1s, 2p₊ e 2p₋ do sistema não perturbado ($\alpha=0$).

O sistema de coordenadas mais conveniente para escrevermos a Hamiltoniana H_0 é o sistema de coordenadas cilíndricas, desse modo teremos,

$$H_0 = - \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 + \gamma L_z + V(z) - \frac{2}{r} R_p^{1/2} \quad (1.8)$$

Nós calculamos os autovalores de H_0 seguindo um procedimento variacional escolhendo a função de onda tentativa da forma,

$$\psi_i(\vec{r}) = C_1 F(z) e^{im\phi} \rho^{|m|} e^{-\frac{b_i \rho^2}{2}} = F(z) \Psi_i(\rho, \phi) \quad (1.9)$$

sendo que o índice $i=1,2,3$ denota os níveis de energia 1s, 2p₊ e 2p₋, que possuem número quântico azimutal m , igual a 0, +1 e -1 respectivamente. C_1 é a constante de normalização, b_i é o parâmetro variacional e $F(z)$ é a função de onda de um elétron no estado fundamental de um poço de potencial unidimensional na direção z , definida como segue,

$$F(z) = \begin{cases} B \cos(K_1 z) & |z| \leq L/2 \\ A e^{-K_2 |z|} & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (1.10)$$

onde os parâmetros K_1 e K_2 são determinados da maneira usual de modo a satisfazerem as condições de continuidade e conservação da corrente nas interfaces do poço. As constantes de normalização A e B são dadas por

$$B = \left(\frac{\cos^2(K_1 L/2)}{K_2} + \frac{\sin(K_1 L)}{2K_1} + \frac{L}{2} \right)^{-1/2}, \quad (1.11)$$

$$A = B \cos\left(\frac{K_1 L}{2}\right) e^{K_2 L/2}. \quad (1.12)$$

É esperado que uma função de onda tentativa com variáveis separadas ρ, ϕ e z apresente bons resultados para poços com largura $L < 300$ angstroms.

A energia do i -ésimo nível é obtida minimizando-se o valor médio da Hamiltoniana H_0 , ou seja, minimizando-se a expressão,

$$E_i = \langle \psi_i | H_0 | \psi_i \rangle, \quad (1.13)$$

em relação aos parâmetros b_i . Portanto, E_i tem a seguinte forma,

$$\begin{aligned} E_i = & \int_{-\infty}^{\infty} dz F(z) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) F(z) + \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho \Psi_i(\rho, \phi) \left(\frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i \gamma \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \Psi_i(\rho, \phi) \\ & - \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho \Psi_i(\rho, \phi) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi_i(\rho, \phi) + \\ & - 2 R_p^{1/2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\phi \frac{|\psi_i(\rho, \phi, z)|^2}{[\rho^2 + (z-z_i)^2]^{1/2}} \end{aligned} \quad (1.14)$$

O cálculo dos três primeiros membros dessa expressão são diretos. No quarto termo, para obtermos a contribuição da interação Coulombiana, nós usamos a transformada de Fourier [2],

$$\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} = \sum_{\vec{q}} \frac{2\pi}{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} e^{-q|z - z_i|} \quad (1.15)$$

onde q é o vetor de onda bidimensional. Assim nossa expressão para a energia coulombiana é

$$E_{\text{Coul}} = -2\pi \sum_{\vec{q}} \frac{F(q)}{q} \int \rho \, d\rho \, d\phi \, |\Psi_i(\rho, \phi)|^2 e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} \quad (1.16)$$

onde

$$F(q) = \int_{-\infty}^{\infty} |F(z)|^2 e^{-q|z - z_i|} \quad (1.17)$$

é o fator de forma para a impureza. Realizando a integração em ϕ podemos escrever a expressão para a energia da forma,

$$E_{\text{Coul}} = -2\pi \sum_{\vec{q}} \frac{F(q)}{q} \int \rho \, d\rho \, |\Psi_i(\rho, \phi)|^2 2\pi J_0(q\rho) \quad (1.18)$$

onde $J_n(x)$ é a função de Bessel de índice n . As formas explícitas das energias dos níveis $1s$, $2p_+$ e $2p_-$, são mostrados a seguir,

$$E_{1s} = K_1^2 + b_1 + \frac{\gamma^2}{4b_1} - 2 \int_0^{\infty} dq \, F(q) \exp(-q^2/4b_1), \quad (1.19)$$

$$E_{2p_+} = K_1^2 + 2b_2 + \gamma + \frac{\gamma^2}{2b_2} - 2 \int_0^{\infty} dq \, F(q) \exp(-q^2/4b_2) \left(1 - \frac{q^2}{4b_2}\right), \quad (1.20)$$

$$E_{2p_-} = K_1^2 + 2b_3 - \gamma + \frac{\gamma^2}{2b_3} - 2 \int_0^{\infty} dq \, F(q) \exp(-q^2/4b_3) \left(1 - \frac{q^2}{4b_3}\right). \quad (1.21)$$

Naturalmente a precisão no cálculo da energia do i -ésimo nível, depende da escolha que fizemos para a função de onda tentativa. Nós optamos pela forma gaussiana, equação (1.9), porque os resultados que obtivemos com ela para a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$, estão muito próximos daqueles de Chang e co-autores [26], para o problema de uma impureza doadora localizada no centro de um poço quântico de GaAs-AlGaAs. E estes resultados foram obtidos através do método variacional de uma maneira mais rigorosa, expandindo-se a função de onda tentativa em um conjunto de bases gaussianas como feito por Greene e Bajaj (GB) [32], corrigidas para a não-parabolicidade das bandas de condução. No trabalho de Chang, os resultados teóricos para a energia de transição sem o efeito polarônico concordam muito bem com os resultados experimentais para campos magnéticos até 9T, como esperado, pois nessa região os efeitos polarônicos tem pouca importância.

Na figura 1.1, temos o gráfico da energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ em função do campo magnético B , para um poço quântico de 138 angstroms de largura de GaAs limitado por $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Os resultados mostrados na figura são aqueles obtidos por nós através da função de onda tentativa gaussiana (linha contínua) e aqueles de GB corrigidos pela não-parabolicidade (NP) das bandas de condução (BC) por Chang (linha tracejada). Como pode ser visto a concordância entre os resultados é excelente, o que justifica o uso da função gaussiana em nossos cálculos. Nota-se então, que o efeito da não-parabolicidade das bandas de condução já está embutido em nossos cálculos via função de onda variacional, quando a impureza está localizada no centro do poço quântico.

1.2.2 Efeito polarônico sobre as energias do doador.

Como o GaAs é um material fracamente polar, o acoplamento elétron-fonons longitudinais óticos (LO) é fraco, no sentido de que a constante de acoplamento α de Fröhlich é bem menor que 1 ($\alpha=0,07$). Assim sendo nós podemos avaliar os efeitos polarônicos através da teoria de perturbação de segunda ordem, considerando H_2 como uma perturbação.

Portanto a energia do i -ésimo nível será dada por:

$$\epsilon_i(B) = E_i(B) + \Delta E_i(B) \quad (1.22)$$

onde $\Delta E_i(B)$ é o deslocamento de energia provocado pela interação elétron-fonons LO na energia $E_i(B)$ não perturbada de um autoestado de H_0 . ΔE_i é dado pela expressão;

$$\Delta E_i = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\vec{k}} |V_k|^2 \frac{|\langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | i \rangle|^2}{E_i + \Delta_i - E_{n-1}} \quad (1.23)$$

onde $|n\rangle$ e $|i\rangle$ são os autoestados da Hamiltoniana não perturbada H_0 , dados na equação (1.9) e Δ_i é um fator que depende da teoria de perturbação a ser usada [33]. Para o nível 1s, $i=1$, fazemos $\Delta_i=0$ o que corresponde, à teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger (RSPT), para os demais estados excitados 2p, $i=2$ e 3 nós fazemos $\Delta_i = \Delta E_i - \Delta E_1$, o que corresponde à teoria de perturbação de Wigner-Brillouin melhorada, IWBPT. Como discutido em vários trabalhos [34] essa teoria de perturbação nos leva ao valor correto do 'pinning' dos níveis de energia e por isso é a mais adequada para tratar o problema do magnetopolaron.

Um dos principais obstáculos para a avaliação da equação (1.23) é que a soma sobre os níveis n , é sobre todos os estados da impureza e nós não conhecemos todas as energias e todas as funções de onda destes estados. Só conhecemos três estados 1s, 2p+ e 2p-. Se limitarmos a soma a estes três níveis apenas, não obteremos bons resultados. No entanto Cohn, Larsen e Lax [31] desenvolveram um método para obtermos a

correção ΔE_i com boa aproximação, que foi usado por eles para o cálculo da energia dos níveis de um doador no CdTe. Nós aqui seguiremos o trabalho desses autores feito originalmente para o caso 3D, generalizando este método para nosso sistema quase-bidimensional (Q2D).

Figura 1.1 Energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ para um poço de 138 angstroms e concentração de Al $x=0.3$, sem o efeito polarônico. A curva contínua representa nossos resultados variacionais obtidos com a função de onda tentativa gaussiana. A linha tracejada representa os resultados obtidos expandindo-se a função de onda tentativa em um grande número de bases gaussianas, incluindo correções devido à não-parabolicidade das bandas de condução.

Começamos escrevendo o elemento de matriz que aparece na expressão do deslocamento de energia de uma maneira mais adequada para nossos propósitos, assim,

$$\begin{aligned} \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | i \rangle &= \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^\infty dz |\Psi_i(\rho, \phi)|^2 |F(z)|^2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} e^{-ik_z z} \\ &= \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle F(k_z) = F(k_z) M_{ni}(\vec{k}) \end{aligned} \quad (1.24)$$

onde

$$F(k_z) = \int_{-\infty}^\infty dz e^{-ik_z z} |F(z)|^2. \quad (1.25)$$

Substituindo este resultado na equação (1.23), obtemos

$$\Delta E_i = \frac{\alpha}{2\pi^2} \sum_{n=0}^\infty \int d^2k \frac{|M_{ni}(\vec{k})|^2}{E_i + \Delta_i - E_{n-1}} \int dk_z |F(k_z)|^2 \frac{1}{k^2 + k_z^2}, \quad (1.26)$$

e realizando a última integral, chegaremos à seguinte expressão,

$$\Delta E_i = \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{n=0}^\infty \int \frac{d^2k}{k} \frac{|M_{ni}(\vec{k})|^2}{E_i + \Delta_i - E_{n-1}} F_Q(k), \quad (1.27)$$

onde $F_Q(k)$ é o fator de forma quase-bidimensional (Q2D), que leva em consideração a dimensionalidade do sistema na direção z , e é dado por,

$$F_Q(k) = \int_{-\infty}^\infty dz \int_{-\infty}^\infty dz' |F(z)|^2 |F(z')|^2 e^{-k|z-z'|} \quad (1.28)$$

Se o sistema for estritamente bidimensional (2D), então $F_Q(k) = 1$. No caso Q2D, F_Q será menor que a unidade e atenuará os efeitos polarônicos em relação ao caso 2D.

Voltemos agora nossa atenção para o denominador D_{ni} que aparece sob o elemento de matriz da equação (1.23). Nós podemos escrever $1/D_{ni}$ como,

$$(D_{ni})^{-1} = \frac{1}{E_n - (\Delta_i + E_i) + 1} = \frac{1}{1+k^2} \left(1 - \frac{E_n - (E_i + \Delta_i) - k^2}{E_n - (E_i + \Delta_i) + 1} \right) \quad (1.29)$$

como pode ser facilmente comprovado. Se fizermos

$$\tilde{\delta}_n = \frac{E_n - (E_i + \Delta_i) - k^2}{1+k^2} \quad (1.30)$$

teremos,

$$(D_{ni})^{-1} = \frac{1}{1+k^2} \left(1 - \frac{\tilde{\delta}_n}{\tilde{\delta}_n + 1} \right). \quad (1.31)$$

Expandindo o termo $(1+\tilde{\delta}_n)^{-1}$, chegaremos a

$$(D_{ni})^{-1} = \frac{1}{1+k^2} (1 - \tilde{\delta}_n(1 - \tilde{\delta}_n + \tilde{\delta}_n^2 - \dots)) = \frac{1}{1+k^2} \left(1 - \tilde{\delta}_n + \tilde{\delta}_n^2 - \frac{\tilde{\delta}_n^3(1+k^2)}{E_n - (E_i + \Delta_i) + 1} \right) \quad (1.32)$$

onde usamos o fato que o último termo dentro dos parenteses equivale a $\tilde{\delta}_n^3 - \tilde{\delta}_n^4 + \tilde{\delta}_n^5 - \dots$. Substituindo esta expressão na equação (1.27) nós podemos escrever o deslocamento de energia devido ao acoplamento elétron-fonons LO, da seguinte forma:

$$\Delta E_i = T_1 + T_2 + T_3 + T_4 \quad (1.33)$$

onde

$$T_1 = -\frac{\alpha}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k} \frac{|M_{ni}(k)|^2}{1+k^2}, \quad (1.34)$$

$$T_2 = - \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k} \frac{|M_{ni}(k)|^2}{1+k^2} \tilde{\delta}_n, \quad (1.35)$$

$$T_3 = - \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k} \frac{|M_{ni}(k)|^2}{1+k^2} \tilde{\delta}_n^2, \quad (1.36)$$

$$T_4 = \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k} \frac{|M_{ni}(k)|^2}{E_n - (E_i + \Delta_i) + 1} \tilde{\delta}_n^3. \quad (1.37)$$

Temos então que calcular cada uma dessas contribuições para ΔE_i . Começamos substituindo a expressão para o elemento de matriz $M_{ni}(k)$, equação (1.24), na equação (1.34) para T_1 , e somando sobre n obtemos ,

$$T_1 = - \frac{\alpha}{2\pi} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k(1+k^2)} \quad (1.38)$$

onde usamos o fato de que os níveis n , formam um conjunto completo e as autofunções são normalizadas. Este termo corresponde ao deslocamento de energia devido à energia de ligação do polaron. No limite de um gás de elétrons estritamente bidimensional, $F_Q = 1$, T_1 é dado por,

$$T_1 = - \frac{\pi\alpha}{2}. \quad (1.39)$$

Podemos escrever da equação (1.30),

$$\tilde{\delta}_n = \frac{E_n - E_i - k^2}{1+k^2} - \frac{\Delta_i}{1+k^2} \quad (1.40)$$

e assim quebrarmos a expressão de T_2 em duas partes, $T_2 = T'_2 + \Delta T_2$, onde

$$T'_2 = - \frac{\alpha}{2\pi} \int d^2k \frac{F_Q(k)}{k(1+k^2)^2} \sum_{n=0}^{\infty} |M_{ni}(k)|^2 (E_n - E_i - k^2) \quad (1.41)$$

usando o seguinte teorema [35],

$$\sum_n (E_n - E_i) | \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle |^2 = k^2 \quad (1.42)$$

vemos que $T'_2=0$, pois,

$$\sum_n (E_n - E_i - k^2) | \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle |^2 = 0 \quad (1.43)$$

Outra maneira de obtermos o mesmo resultado para T'_2 , que nos será muito útil mais à frente, é escrevermos a equação (1.42) da forma,

$$\begin{aligned} & \sum_n (E_n - E_i) \langle i | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | n \rangle \langle n | e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle = \\ & = \sum_n \langle i | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} H_0 | n \rangle \langle n | e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle - \sum_n \langle i | H_0 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | n \rangle \langle n | e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle \end{aligned} \quad (1.44)$$

onde usamos o fato que $H_0 | n \rangle = E_n | n \rangle$. Proseguindo essas equações acima serão iguais a,

$$\langle i | [e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}, H_0] e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} | i \rangle = \langle i | H_0(\vec{\Pi} + \vec{k}) - H_0(\vec{k}) | i \rangle \quad (1.45)$$

sendo que $[A, B]$ representa o comutador de A com B e o operador momento $\vec{\Pi}$ é tal que,

$$\Pi^2 = -\nabla^2 + \gamma L_z + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 \quad (1.46)$$

e

$$H_0(\vec{\Pi}) = \Pi^2 - \frac{2}{f} R_p^{1/2} + V(z) \quad (1.47)$$

Logo o resultado da equação (1.44) será, $\langle i|(k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{\Pi})|i \rangle = k^2$, desde que os autoestados têm paridade definida teremos então que $\langle i|2\vec{k} \cdot \vec{\Pi}|i \rangle = 0$, o que está de acordo com nosso resultado anterior. Então o termo T_2 será dado por, $T_2 = \Delta T_2$. E o termo ΔT_2 é da ordem de α^2 , como no nosso caso $\alpha \ll 1$ fazer $T_2 = 0$, deve ser uma boa aproximação. Desprezar esse termo é equivalente a executarmos a seguinte aproximação na equação (1.40),

$$\tilde{\delta}_n = \frac{E_n - E_i - k^2}{1 + k^2} \quad (1.48)$$

Naturalmente essa aproximação será mais válida quanto menor for a diferença entre as energias ϵ_i e E_i , e nós passaremos a adota-la daqui para a frente.

Na expressão para T_3 , equação (1.36), vamos realizar a soma sobre o índice n . Deste modo escrevemos,

$$\sum_n (E_n - E_i - k^2)^2 |\langle n|e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}|i \rangle|^2 = \sum_n \left\{ (E_n - E_i)^2 - 2k^2(E_n - E_i) + k^4 \right\} |\langle n|e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}|i \rangle|^2 \quad (1.49)$$

Notemos que

$$\begin{aligned} \sum_n (E_n - E_i)^2 |\langle n|e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}|i \rangle|^2 &= \langle i|[[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}, H_0], H_0]e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}|i \rangle = \\ &= \langle i|[[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}, H_0], e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}]|i \rangle = \langle i|(k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{\Pi})^2|i \rangle \end{aligned} \quad (1.50)$$

Assim a soma em T_3 se reduz a $4 \langle i|(\vec{k} \cdot \vec{\Pi})^2|i \rangle$, e portanto,

$$T_3 = -2\alpha \langle i|\Pi_{2D}^2|i \rangle \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(1+k^2)^3} F_Q(k) \quad (1.51)$$

onde $\vec{\Pi}_{2D}$ é o componente no plano (ρ, ϕ) do operador $\vec{\Pi}$. No caso bidimensional puro (2D) teremos,

$$T_3 = -\frac{\pi\alpha}{8} \langle i | \Pi_{2D}^2 | i \rangle \quad (1.52)$$

Resumindo para o caso particular do gás de elétrons bidimensionais (GE2D), o deslocamento da energia do elétron devido ao acoplamento elétron fonons LO é dado por,

$$\Delta E_i = -\frac{\pi\alpha}{2} - \frac{\pi\alpha}{8} \langle i | \Pi_{2D}^2 | i \rangle + T_4 \quad (2D) \quad (1.53)$$

e da equação (1.23)

$$\epsilon_i = E_i + \Delta E_i = \langle i | \left(1 - \frac{\pi\alpha}{8}\right) \Pi^2 - R_p^{1/2} \frac{2}{f} | i \rangle - \frac{\pi\alpha}{2} + T_4 \quad (1.54)$$

Como sabido, a massa do polaron 2D é $m_p = \left(1 + \frac{\pi\alpha}{8}\right)$.

Embora tenhamos feito algumas pequenas aproximações, continuamos com o mesmo problema para a avaliação de T_4 que tínhamos antes para a avaliação de ΔE_i , ou seja, a soma sobre todos os níveis. Naturalmente nós teremos que limitar a soma no termo T_4 aos três níveis conhecidos. A precisão dessa aproximação foi estudada em detalhes e os resultados obtidos no caso de doadores no CdTe estão em boa concordância com os dados experimentais. Destaque-se, que truncando-se a soma na equação (1.23) diretamente, os resultados obtidos por CLL não foram satisfatórios para descrever o experimento.

Os elementos de matriz entre os três estados $1s$, $2p_+$ e $2p_-$, que aparecem na expressão de T_4 são dados por,

$$M_{2p_+, 1s} = -\frac{b_1^{1/2} b_2}{2\beta_{12}^2} k e^{-k^2/4\beta_{12}} \quad (1.55)$$

$$M_{2p-,1s} = - \frac{b_1^{1/2} b_3}{2\beta_{13}^2} k e^{-k^2/4\beta_{13}} \quad (1.56)$$

$$M_{2p+,2p-} = - \frac{b_2 b_3}{4\beta_{23}^2} k e^{-k^2/4\beta_{23}} , \quad (1.57)$$

onde $\beta_{ij} = (b_i - b_j)/2$ e os b_i 's são nossos parâmetros variacionais obtidos no cálculo das energias dos níveis não perturbados, sem o efeito polarônico. Então com os valores dos b_i 's calculamos numericamente a energia do i -ésimo nível da impureza,

$$\epsilon_i = E_i + T_1 + T_3 + T_4 \quad (1.58)$$

Na próxima seção apresentamos nossos resultados para a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ e comparamos com os resultados experimentais disponíveis.

1.3 Comparação com os resultados experimentais

Para obtermos a energia de transição do nível $1s$ para o nível $2p_+$, nós calculamos a energia dos níveis não perturbados minimizando as equações (1.19–21) em relação aos parâmetros variacionais b_i . Com esses parâmetros calculados, obtivemos o deslocamento dos níveis de energia do elétron ligado provocado pelo efeito polarônico e encontramos assim a energia do i -ésimo nível, ϵ_i , através da equação (1.58).

Em nossos cálculos numéricos consideramos um poço quântico de GaAs- $\text{Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$ com largura de 100 angstroms. A massa de banda do elétron em unidades da massa do elétron livre m_e , é $m_1=0.067$ no GaAs e $m_2=m_1+0.083x$ no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Tomamos a energia do gap, E_g , do GaAs como 1520 meV, $\hbar W_{LO}=36.77$ meV,

$r_p=39,35$ meV e $\epsilon_0=12,5$. Como a densidade eletrônica nas amostras usadas nos experimentos é bem baixa, não consideramos efeitos de blindagem da interação elétron-fonons devido aos elétrons livres, de modo que o único efeito a reduzir o acoplamento é o fator de forma da heteroestrutura.

Na figura 1.2 nós mostramos os resultados para a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$, como função do campo magnético aplicado. Os resultados de nossos cálculos são mostrados pelas linhas sólidas (com o efeito polarônico) para a impureza localizada no centro do poço (A) e na interface entre os dois semicondutores (B), respectivamente $z_I=0$ e $z_I=L/2$. Os pontos circulares e os triângulos são os resultados experimentais de Huan et al. e co-autores [25] obtidos através de medidas de transmissão magneto-óptica (TMO) e de magneto-fotocondutividade (MFC). Os pontos circulares correspondem às posições dos picos no espectro de TMO e MFC e são interpretados como devido às transições $1s \rightarrow 2p_+$ de doadores no centro do poço. A concordância entre esse conjunto de dados com o resultado teórico é excelente. Como vemos há um forte “pinning” da energia de transição à medida que a separação entre os níveis $1s$ e $2p_+$, aproxima-se da energia dos fonons longitudinais óticos (LO) do GaAs. A separação ressonante dos níveis ocorre em $B=16T$, para a impureza no centro do poço e a separação (split) dos níveis de energia se dá em dois ramos, esse fato é também suportado pelo ponto experimental que aparece com energia acima de $\hbar W_{LO}$.

O conjunto de triângulos na figura 1.2 mostra as posições dos picos dessas transições ($1s \rightarrow 2p_+$) que aparecem quando dopantes são introduzidos na barreira. A exata origem desses picos ainda não é bem conhecida, mas a opinião geral [36,37] é que ela não pode ser encontrada na teoria de uma única impureza. Esses picos têm sua posição muito próxima daquela esperada para impurezas na interface como observamos da figura, mas eles não são devido a esse tipo de impurezas.

Ressalte-se que não foi necessário incluir a não parabolicidade das bandas de condução nos cálculos, já que esse efeito está embutido na nossa função de onda

variacional como discutido na seção 1.2.1.

Figura 1.2. Comparação entre os resultados teóricos (linhas cheias) e experimentais (pontos circulares e triângulos) para a energia de transição (meV) entre os níveis $1s \rightarrow 2p_+$ de uma impureza doadora localizada no centro (A) e na interface (B) de um poço quântico de $\text{GaAs-Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ de 100 angstroms de largura, em função do campo magnético (Tesla).

A energia de transição em função do campo magnético para uma impureza

localizada fora do poço quântico de GaAs, na região da barreira de potencial no AlGaAs, a uma distância $L/2$ da interface ($z_1=L$) é mostrada na figura 1.3. A linha tracejada representa nossos resultados sem a inclusão do efeito polarônico e a linha cheia com a inclusão desse efeito. Comparando esses dois resultados vemos mais claramente o efeito “pinning” provocado pela interação elétron-fonons LO. Os pontos circulares são os resultados experimentais de Huan e co-autores [38].

A concordância entre os resultados experimentais e os teóricos é boa na região de campos fracos ($B < 8T$) e fica cada vez pior à medida que nos aproximamos da ressonância. No entanto se acrescentarmos nos cálculos o efeito da não parabolicidade (NP) das bandas de condução, a concordância melhora bastante como pode ser observado na figura 1.4. Incluímos a NP através da expressão de Palik e co-autores [39] obtida do modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de Kane para um modelo de três bandas, ou seja, consideramos a energia do nível i como,

$$E_{NP}^i = E_i \left(1 - \delta_2 \frac{E_i}{E_g} \right) + \Delta E_i \quad (1.59)$$

onde δ_2 é o parâmetro da NP e é determinado da estrutura de bandas do material. Usamos neste trabalho $\delta_2=0.95$, que é o valor determinado por nós em um trabalho anterior [18] sobre ressonância ciclotrônica em um poço quântico de GaAs.

Alguns autores [36] acham que para esse tipo de impureza localizada na barreira entre os poços de uma estrutura de múltiplos poços quânticos (MQW), a aproximação de um único poço não é suficiente para resolver satisfatoriamente o problema. Aí poderia estar a explicação para o fato de termos de aumentar a contribuição da NP das bandas para “fitar” os resultados experimentais.

Baseados nestes fatos e incentivados por Huan [36], nós resolvemos o problema de uma impureza localizada no centro das barreiras de uma estrutura de duplos poços quânticos (DQW). Os resultados que obtivemos para as energias de transição $1s \rightarrow 2p_+$

em função do campo magnético aplicado, diferiam pouco daqueles para um único poço. De modo que considerar uma estrutura de dois poços somente não se mostra suficiente para uma solução adequada.

Figura 1.3— Energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ entre os níveis de uma impureza doadora localizada no centro da barreira ($z_1=L/2$) entre dois poços quânticos de GaAs- $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$. A linha cheia (tracejada) é o nosso resultado com (sem) a interação polarônica e os círculos os resultados experimentais.

Figura 1.4— Energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ entre os níveis de uma impureza doadora localizada no centro da barreira ($z_1=L/2$) entre dois poços quânticos de GaAs- $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$. Incluímos nos cálculos uma NP extra como descrita no texto. A linha cheia (tracejada) é o nosso resultado com (sem) a interação polarônica e os círculos os resultados experimentais.

Shi e Peeters [37] em um trabalho posterior calcularam a energia de transição $1s \rightarrow 2p_+$ para uma impureza doadora localizada em uma super-rêdes de GaAs-AlGaAs

na presença de um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento. Eles também usaram o método variacional com uma função de onda tentativa gaussiana (com dois parâmetros variacionais) e incluíram a correção polarônica via teoria de perturbação de segunda ordem.

Seus resultados também foram comparados com os dados experimentais de Huant e co-autores [25,38] e a concordância foi excelente para a impureza no centro de um poço e no centro da barreira entre dois poços, enquanto a concordância para a impureza na interface (B) foi péssima. Efeitos de NP foram incluídos nos cálculos através da dependência da massa efetiva com a energia do elétron.

A explicação para a não concordância com os resultados experimentais quando dopantes são introduzidos na barreira denotados por B na figura 1.2, é facilmente justificável desde que a exata origem desses picos não é conhecida. A concordância para a impureza no centro da barreira reforça a idéia de que a aproximação de um poço simples é insuficiente. No entanto devemos observar que nesse trabalho de Shi e co-autores [37], o efeito polarônico é incluído via teoria de perturbação sem nenhum cuidado especial, ou seja, a soma sobre os três níveis conhecidos é feita diretamente. Este fato pode ser o responsável por alguns resultados inesperados, que são encontrados neste trabalho. Por exemplo espera-se que a campos fracos a energia de transição com (CF) e sem (SF) o efeito polarônico coincida, e que com o crescimento do campo aplicado a curva CF se afaste daquela SF, tornando-se menor aproximando o ponto de saturação (efeito pinning). O que observamos é que os resultados de Shi [37], se opõem a esses argumentos, a curva CF na região de campos fracos está acima da SF, e se aproxima desta com o crescer do campo aplicado.

Resumindo nossos resultados para a energia de transição de um magnetopolaron entre os níveis $1s \rightarrow 2p_+$ de uma impureza doadora localizada no centro de um poço e na interface, de uma estrutura de múltiplos poços quânticos de GaAs, concordam muito bem com os dados experimentais de Huant e co-autores [25,38] e mostram claramente

que o pinning da energia de transição se dá quando a separação dos níveis de energia se aproxima da energia de um fonon LO, $\hbar W_{LO}$. Verificamos também que a energia de transição diminui à medida que a impureza se desloca do centro do poço para fora deste.

CAPÍTULO 2

EFEITOS DA INTERAÇÃO ELETRON-FONON SOBRE A MASSA CICLOTRÔNICA
DE ELÉTRONS CONFINADOS EM FIOS QUÂNTICOS.

2.1 Introdução

Os efeitos polarônicos sobre as propriedades de sistemas eletrônicos confinados mostram-se mais claramente na dependência da massa de renormalização do elétron com o campo magnético aplicado à amostra. Tais massas efetivas são usualmente medidas em experimentos de Ressonância Ciclotrônica (RC), onde a interação dos elétrons com os fonons óticos leva a um apreciável deslocamento do pico de RC, que é interpretado como sendo devido à renormalização da massa do elétron.

Resultados de RC para heteroestruturas de GaAs-AlGaAs [22-24] e estruturas de metal-óxido-semicondutor (MOS) de InSb [21] e CdHgTe [40], mostram que a massa ciclotrônica cresce com o campo magnético $\vec{B}$. Esse crescimento é quase linear com B na região de campos fracos e se torna mais abrupto à medida que a energia do campo magnético aproxima-se da energia dos fonons longitudinais óticos (LO) do material. No caso do GaAs-AlGaAs os efeitos polarônicos são reduzidos em relação àqueles do volume (bulk) do GaAs, devido a efeitos como a extensão finita da função de onda eletrônica e à blindagem da interação elétron-fonons devido à presença de outros elétrons. No caso de MOS de InSb esta situação é invertida, sendo que neste material os efeitos de muitos corpos não são importantes e o ingrediente crítico é a forte não parabolicidade das bandas de condução.

Avanços nas técnicas de litografia e de epitaxia por feixe molecular (MBE), permitiram submeter o gás de elétrons quase-bidimensional (Q2D) presente em heteroestruturas de GaAs-AlGaAs [41], ou estruturas de metal-óxido-semicondutor (MOS) de p-InSb a um potencial de confinamento lateral extra, que restringe seu movimento em uma segunda dimensão, conferindo a esse sistema propriedades de transporte quase-unidimensionais (Q1D). Tais estruturas assim construídas, são conhecidas como fios quânticos, pelo fato do movimento eletrônico ser livre em uma dimensão e confinado por potenciais nas outras duas direções perpendiculares.

Simulações para heteroestruturas de GaAs-AlGaAs sugerem que o potencial de confinamento lateral é aproximadamente harmônico [42]

A interação de elétrons com os fonons LO em fios quânticos foi estudada por vários autores para fios com diferentes formas [43-46]. Para fios quânticos de GaAs-AlGaAs com confinamento lateral parabólico na direção y , Degani e Farias [47] obtiveram as correções polarônicas para a auto-energia e massa efetiva do elétron. Eles verificaram que a massa efetiva do polaron cresce com o aumento da magnitude do potencial de confinamento e com a redução da extensão finita da função de onda na direção z .

Neste capítulo nós investigamos o comportamento com o campo magnético aplicado da massa efetiva ciclotrônica de polarons confinados em fios quânticos parabólicos crescidos a partir de heteroestruturas de GaAs-AlGaAs e de MOS de InSb [48]. Em nossos cálculos consideramos apenas a interação com os fonons LO e desprezamos os fonons interfaciais. Também outros efeitos como a blindagem do acoplamento pelos portadores livres, não-parabolicidade da banda de condução e extensão finita da camada eletrônica na direção z não são considerados.

As correções polarônicas para o cálculo da massa são calculadas através da teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT), em todas as regiões de interesse, regiões de campos fracos, fortes e ressonantes, para fios Q1D de GaAs e InSb.

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

Considere um fio quântico quase-unidimensional composto de material semiconductor polar, sob a ação de um campo magnético $\vec{B}$ uniforme aplicado na direção z. O potencial de confinamento do elétron em tal fio é considerado como sendo parabólico na direção y, com energia $\hbar\Omega$, e infinito na direção z. Um elétron em tal sistema tem seu movimento quantizado no plano (x,y).

Na aproximação de massa efetiva a hamiltoniana de um elétron nesse fio interagindo com os fonons LO do semiconductor pode ser escrita na forma:

$$H = \frac{1}{2m_b} \left(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{1}{2} m_b \Omega^2 y^2 + \sum_{\vec{Q}} \hbar W_{LO} a_{\vec{Q}}^\dagger a_{\vec{Q}} + H_{e-ph} \quad (2.1)$$

onde o momento do elétron é $\vec{P}=(P_x; P_y)$, sua massa efetiva é m_b e seu vetor de onda $\vec{K}=(K_x; K_y)$. O potencial vetor no calibre de Landau é $\vec{A}=-By\hat{x}$ e $\hbar W_{LO}$ é a energia dos fonons LO de vetor de onda $\vec{Q}=(\vec{q}, q_z)$, que têm $a_{\vec{Q}}^\dagger$ e $a_{\vec{Q}}$ como seus operadores criação e destruição.

A hamiltoniana de interação elétron-fonons LO de Fröhlich é dada por,

$$H_{e-ph} = \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \hbar W_{LO} \sum_{\vec{Q}} \frac{1}{Q} \left\{ e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} a_{\vec{Q}} + e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} a_{\vec{Q}}^\dagger \right\} \quad (2.2)$$

onde $r_p=(\hbar/2m_b W_{LO})^{1/2}$ é o raio do polaron, α a constante de acoplamento elétron-fonon LO de Fröhlich, V o volume de normalização e $\vec{r}=(x,y)$ o vetor posição do

elétron.

A parte eletrônica na equação (2.1) pode ser rearranjada e escrita na forma:

$$H_e = \left\{ \frac{P_y^2}{2m_b} + \frac{m_b \tilde{\omega}_c^2 (y - y_0)^2}{2} \right\} + \gamma \frac{P_x^2}{2m_b} \quad (2.3)$$

onde $\gamma = 1 - (\omega_c^2 / \tilde{\omega}_c^2)$, sendo $\omega_c = (eB/m_b c)$ a frequência de ciclotron e $\tilde{\omega}_c = (\omega_c^2 + \Omega^2)^{1/2}$.

O primeiro termo entre as chaves é a hamiltoniana de um oscilador harmônico simples de frequência característica $\tilde{\omega}_c$, com centro deslocado de $y_0 = K_x \tilde{l}_0^2$, com $\tilde{l}_0^2 = l_0^2 (\omega_c / \tilde{\omega}_c)^2$ e l_0 é o raio da órbita clássica de Landau $l_0 = (\hbar c / eB)^{1/2}$. O limite para o gás de elétrons estritamente bidimensional (2D) é reobtido fazendo-se $\Omega = 0$, ou seja, $\gamma = 0$.

No regime de acoplamento fraco, $\alpha \ll 1$, o deslocamento ΔE_N da energia do elétron no nível N de Landau,

$$E_N = (N + \frac{1}{2}) \hbar \tilde{\omega}_c + \gamma \frac{\hbar^2 K_x^2}{2m_b}, \quad (2.4)$$

devido ao acoplamento elétron-fonon LO pode ser obtido através da teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT).

Assim,

$$\Delta E_N(K_x) = - \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\vec{Q}} \frac{|\langle N', K_x - q_x; \vec{Q} | H_{e-ph} | N, K_x; 0 \rangle|^2}{E_{N'}(K_x - q_x) + \hbar W_{LO} - E_N(K_x) - \Delta_N}, \quad (2.5)$$

onde o "Ket" $|N, K_x; 0\rangle$ descreve o estado composto de um elétron no nível de Landau N, com momento K_x e o vácuo dos fonons LO. O denominador de energia na equação (2.5) pode ser escrito como,

$$D_{NN'} = (N' - N) \hbar \tilde{\omega}_c + \hbar W_{LO} + \frac{\hbar^2 \gamma}{2m_b} (q_x^2 - 2K_x q_x) - \Delta_N \quad (2.6)$$

onde Δ_N é um fator que depende do tipo de teoria de perturbação que está sendo usada, como discutido na referência [33]. Para o nível $N=0$ nós usamos $\Delta_N=0$, que corresponde à teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger (RSPT). No caso do nível $N=1$ usamos $\Delta_N=\Delta E_1-\Delta E_0$ que corresponde à teoria de perturbação de Wigner Brillouin melhorada (IWBPT), que nos leva ao valor correto do “pinning” dos níveis de Landau [34].

Realizando a integração sobre q_z na equação (2.5), obtemos,

$$\Delta E_N(K_x) = - \left(\frac{2\pi\alpha\hbar^2 W_{LO}^2 r_p}{S} \right) \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{q} \frac{|V_{NN'}|^2}{D_{N'N}} \quad (2.7)$$

com

$$V_{NN'} = \int_{-\infty}^{\infty} u_N(y - \hat{l}_o^2 K_x) u_{N'}(y - \hat{l}_o^2 (K_x - q_x)) e^{-iq_y y} dy \quad (2.8)$$

onde $u_N(y - y_o)$ é a função de onda de um oscilador harmônico com centro deslocado e S a superfície de normalização. Para colocar a expressão (2.7) em unidades adimensionais nós dividimos todas energias por $\hbar W_{LO}$ e os comprimentos pelo raio do polaron. Realizando a integração na variável y , na equação (2.8) e substituindo o resultado na equação (2.7), chegamos à seguinte expressão para o deslocamento de energia dos níveis de Landau devido ao efeito polarônico,

$$\Delta E_N(K_x) = - \frac{\alpha}{2\pi} \sum_{N'=0}^{\infty} \frac{N_2!}{N_1!} \int_0^{\infty} dq e^{-q^2 \delta / \lambda^2} (q^2 \delta / \lambda^2)^{N_1 - N_2} \{ L_{N_2}^{N_1 - N_2} (q^2 \delta / \lambda^2) \}^2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{1 + (N' - N)\lambda^2 + \gamma q_x^2 - 2\gamma K_x q \cos(\phi) - \Delta_N} \quad (2.9)$$

onde $N_2 = \min(N, N')$, $N_1 = \max(N, N')$, $\lambda^2 = (\hbar \tilde{\omega}_c / \hbar w_{LO})$, $\delta = (\omega_c / \tilde{\omega}_c)$ e ainda $q_x = q \cos(\phi)$, com $\vec{q} = (q_x, q_y)$.

Tradicionalmente em experimentos de ressonância ciclotrônica consideram-se as transições óticas entre os dois primeiros níveis de Landau $N=0$ e $N=1$ da sub-banda mais baixa e mede-se a frequência de ressonância ciclotrônica,

$$\tilde{\omega}_c^* = \frac{E_1^* - E_0^*}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \{ \tilde{\omega}_c + (\Delta E_1 - \Delta E_0) \} \quad (2.10)$$

com $\tilde{\omega}_c^* = (\omega_c^{*2} + \Omega^2)^{1/2}$ e $\omega_c^* = (eB/m_b^*c)$, m_b^* sendo a massa efetiva do magnetopolaron,

$$\frac{m_b^*}{m_b} = \frac{\hbar \omega_c}{\hbar W_{LO}} \left((\lambda^2 + (\Delta E_1 - \Delta E_0))^2 - \left(\frac{\hbar \Omega}{\hbar W_{LO}} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (2.11)$$

Nosso propósito é investigar o comportamento da massa do magnetopolaron em função do campo magnético para todos os valores de campos, a saber, abaixo da ressonância ($\lambda^2 < 1$), para campos fortes ($\lambda^2 > 1$) e na região ressonante ($\lambda^2 = 1$). A seguir estudamos detalhadamente cada uma dessas regiões.

2.2.1 Campo magnético fraco.

Na região abaixo da ressonância $\lambda^2 < 1$, o denominador da equação (2.9), será sempre positivo, $D_{NN'} > 0$, permitindo-nos fazer a seguinte transformação:

$$\frac{1}{D_{NN'}} = \int_0^\infty dt e^{-t D_{NN'}} \quad (2.12)$$

que substituída na expressão (2.9) produz,

$$\Delta E_N(K_x) = -\frac{\alpha}{2\pi} \sum_{N'=0}^{\infty} \frac{N_2!}{N_1!} \int_0^\infty dq \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-q^2 \delta / \lambda^2} (q^2 \delta / \lambda^2)^{N_1 \cdot N_2} \{ L_{N_2}^{N_1 \cdot N_2} (q^2 \delta / \lambda^2) \}^2.$$

$$\int_0^{\infty} dt e^{-t[1+\lambda^2(N'-N)-\Delta_N]} e^{-t[\gamma q^2 \cos^2(\phi) - 2K_x q \delta \cos(\phi)]} \quad (2.13)$$

Essa equação ainda pode ser posta em uma forma mais conveniente se utilizarmos a identidade:

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-t\gamma[q^2 \cos^2 \phi - 2K_x q \cos \phi]} = 4 \int_0^{\pi/2} d\phi e^{-q^2 \gamma t \cos^2(\phi)} \cosh(2K_x \gamma t q \cos(\phi)) \quad (2.14)$$

Reescrevendo então a expressão final para o deslocamento da energia dos níveis de Landau ΔE_N teremos,

$$\Delta E_N(K_x) = -\frac{\alpha}{2\pi} \sum_{N'=0}^{\infty} \frac{N_2!}{N_1!} \int_0^{\infty} dq \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-q^2 \delta / \lambda^2} (q^2 \delta / \lambda^2)^{N_1 \cdot N_2} \{L_{N_2}^{N_1 \cdot N_2}(q^2 \delta / \lambda^2)\}^2.$$

$$\int_0^{\pi/2} d\phi e^{-t[1+\lambda^2(N'-N)-\Delta_N]} e^{-t\gamma q^2 \cos^2(\phi)} \cosh(2K_x q t \gamma \cos(\phi)) \quad (2.15)$$

Para obtermos a massa ciclotrônica precisamos dos deslocamentos da energia dos níveis $N=0$ e $N=1$. Temos então que realizar as somas sobre N' . Para o nível $N=0$, temos $N_1=N'$, $N_2=0$ e $L_0^{N'}(x) = 1$, de modo que a soma sobre N' é simplesmente,

$$\sum_{N'=0}^{\infty} \frac{1}{N'!} \left(\frac{q^2 \delta}{\lambda^2}\right) e^{-t\lambda^2 N'} = \exp\left(\frac{q^2 \delta e^{-t\lambda^2}}{\lambda^2}\right) \quad (2.16)$$

e a expressão para $\Delta E_0(K_x)$ após a integração em q é dada por,

$$\Delta E_0(K_x) = -\frac{\alpha}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t(1-\Delta_0)}}{\sqrt{\gamma t}} \int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{K_x^2 t \gamma \cos^2(\phi)}{\cos^2(\phi) + \eta(t)/\gamma}\right) \{\cos^2(\phi) + \eta(t)/\gamma\}^{-1/2} dt \quad (2.17)$$

onde $\eta(t) = \frac{\delta(1-e^{-\lambda t})}{\lambda^2 t}$. (2.18)

A expressão para $\Delta E_o(K_x)$ pode ser expandida em potências de K_x^2 , em torno de $K_x=0$,

$$\Delta E_o(K_x) = \Delta E_o(0) + \Delta E_o'(K_x) K_x^2 + \dots \quad , \quad (2.19)$$

com

$$\Delta E_o'(K_x) = \left(\frac{\partial}{\partial K_x^2} \Delta E_o(K_x) \right)_{K_x=0} \quad (2.20)$$

A correção na energia do estado fundamental do magnetopolaron será dada pelo termo de ordem zero,

$$\Delta E_o(0) = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dt \frac{e^{-t(1-\Delta_o)}}{\sqrt{t}} \frac{1}{\sqrt{\gamma+\eta(t)}} \kappa(u(t)) \quad , \quad (2.21)$$

com

$$u(t) = \left(\frac{\gamma}{\gamma+\eta(t)} \right)^{1/2} \quad (2.22)$$

onde $\kappa(x)$ é a integral elíptica completa de primeira espécie.

Podemos utilizar o resultado da expansão (2.19) para calcularmos a massa do magnetopolaron na direção x e esta massa estará relacionada da maneira usual ao coeficiente $\Delta E_o'(0)$ de K_x^2 .

O deslocamento da energia do nível $N=1$ provocado pelo acoplamento elétron-fonons LO, tem a seguinte forma,

$$\Delta E_1(0) = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t(1-\Delta_1)}}{\sqrt{t}} \frac{1}{\sqrt{\gamma+\eta(t)}} \kappa(u(t)) +$$

$$-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t(1-\Delta_1)}}{t^{3/2}} \frac{\delta}{\lambda^2} \frac{1}{(\gamma+\eta(t))^{3/2}} \left(\kappa(u(t)) + u \kappa'(u(t)) \right) \quad (2.23)$$

onde

$$\kappa'(u) = \frac{\partial}{\partial u} \kappa(u)$$

Temos então os deslocamentos ΔE_0 e ΔE_1 e podemos assim calcular a massa ciclotrônica como função do campo magnético aplicado, através da equação (2.11). Nossos cálculos são para fios quânticos Q1D crescidos a partir de heteroestruturas de GaAs–Al_xGa_{1-x}As e estruturas de metal-óxido-semicondutor de InSb, nos quais os elétrons estão confinados no GaAs e no InSb respectivamente. Os parâmetros numéricos que usamos foram:

GaAs:	$\alpha=0.0700$	$r_p=3.9870\text{nm}$	$\hbar W_{LO}=36.17\text{meV}$	$m_b=0.06624 m_0$
InSb:	$\alpha=0.0196$	$r_p=10.594\text{nm}$	$\hbar W_{LO}=24.41\text{meV}$	$m_b=0.01390 m_0$

Estas estruturas crescidas nos laboratórios possuem potenciais de confinamento ($\hbar\Omega$) tipicamente no intervalo entre 0 e 2,5 meV para o GaAs e entre 0 e 12 meV para o InSb.

Na figura 2.1 mostramos nossos resultados para a massa ciclotrônica (m_b^*/m_b) em função do campo magnético ($\lambda_c^2 = \hbar\omega_c/\hbar W_{LO}$) para três fios quânticos de GaAs com potenciais de confinamento $\hbar\Omega=2$ (linha tracejada); $\hbar\Omega=1,5$ (linha fina) e $\hbar\Omega=0$ (linha grossa) meV.

Quando $\hbar\Omega=0$ o elétron está livre no plano (x,y), ou seja, o sistema é

estritamente 2D, e esse resultado foi incluído para comparação. Como vemos da figura a massa para o sistema estritamente 2D é maior que a massa de banda do elétron e cresce monotonicamente com o campo magnético. Este crescimento se torna mais abrupto à medida que ω_c se aproxima de W_{LO} . Para o caso Q1D observamos um comportamento diferente. Na região de campos fracos a massa diminui com o aumento do campo magnético até um certo ponto e depois passa a crescer, sendo que em um determinado ponto o sistema deixa de ser Q1D e se comporta como 2D. Na figura as curvas se sobrepõem a partir deste ponto, cuja posição depende claramente do potencial de confinamento.

No sistema Q1D temos uma competição entre a energia do campo magnético transferida ao elétron e a energia do potencial de confinamento do fio. No limite de campos magnéticos fortes ($\omega_c > W_{LO}$) a energia do campo magnético supera aquela do confinamento do fio e o sistema se torna 2D.

O comportamento da massa ciclotrônica em função do campo magnético para fios de InSb com potenciais de confinamento $\hbar\Omega=0, 3$ e 11 meV, são mostrados na figura 2.2. Como vemos, o comportamento qualitativo da massa é o mesmo que para o fio quântico de GaAs, só que como os potenciais de confinamento são maiores as diferenças com o sistema 2D são mais marcantes. Para $\hbar\Omega=11$ meV o sistema não se torna 2D para nenhum valor do campo magnético, na região abaixo da ressonância. Já para $\hbar\Omega=3$ meV, o sistema se torna bidimensional nas proximidades de $\lambda_c^2=0,6$; um valor bem superior aos $\lambda_c^2=0,3$ para um fio de GaAs com $\hbar\Omega=2$ meV (figura 2.1). Isso se deve ao fato de que a frequência dos fonons LO no GaAs é maior que no InSb, ou seja, a relação entre $\hbar\Omega$ e $\hbar W_{LO}$ é muito diferente nos dois materiais.

No caso do fio de GaAs, a principal diferença entre a massa ciclotrônica 2D e Q1D localiza-se na região de campos magnéticos baixos. Isso também é verdade no caso do fio de InSb, quando o potencial de confinamento é pequeno. É bem conhecido que nesta região de campos baixos $\lambda_c^2 \ll 1$, longe da ressonância, a teoria de

perturbação RSPT dá bons resultados, sendo assim usaremos este fato para estudar o comportamento da massa nessa região, independente do potencial de confinamento. Na RSPT temos $\Delta_0=0, \Delta_1=0$, assim das equações (2.21) e (2.22) teremos,

Figura 2.1—Comportamento da massa ciclôtrônica em função do campo magnético para fios quânticos de GaAs com potenciais de confinamento 0 (linha sólida grossa); 1.5 (linha sólida fina) e 2 (linha tracejada) meV. Quando $\hbar\Omega=0$ o sistema é bidimensional puro (2D). A massa ciclôtrônica na região $\lambda_c^2 < 0,3$, é maior quanto maior o potencial de confinamento, para um mesmo campo.

$$\Delta E_{CR} = \Delta E_1 - \Delta E_0 = -\frac{\pi^{1/2}\alpha}{2\lambda^2} \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{t^{3/2}} \left(\frac{t\lambda^2}{1+\exp(t\lambda^2)} \right)^{3/2} [\cosh(\lambda^2 t) - 1] F(t) \quad (2.24)$$

onde

$$F(t) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\eta(t)}{\delta} \right)^{3/2} \frac{\delta}{(\gamma + \eta(t))^{3/2}} [\kappa(u(t)) + u \kappa'(u(t))] \quad (2.25)$$

é o fator de forma que leva em consideração a dimensionalidade do sistema. Sabemos que quando $\hbar\Omega=0$, teremos $\delta=1$, $\gamma=0$ e $u=0$, logo $\kappa(0)=\pi/2$. Substituindo estes valores na expressão (2.25), teremos $F(t)=1$. Neste caso a equação (2.24) é a expressão do deslocamento de energia dos níveis de Landau para o caso de um gás de elétrons estritamente 2D.

Para qualquer outro valor de $\hbar\Omega$, $F(t)$ será menor que 1 e seu valor tenderá a 1 quando $\gamma \rightarrow 0$ e $\delta \rightarrow 1$, lembrando que;

$$\gamma = 1 - \frac{\tilde{\omega}_c^2}{\omega_c^2}, \quad \delta = \frac{\tilde{\omega}_c}{\omega_c}, \quad \tilde{\omega}_c = (\Omega^2 + \omega_c^2)^{1/2}.$$

Agora se o potencial de confinamento é pequeno, a baixos campos a diferença entre $\tilde{\omega}_c$ e ω_c é maior e γ está mais longe de zero, assim, $F(t)$ será pequeno e atenuará fortemente ΔE_{CR} em comparação com o caso 2D puro. Aumentando o valor do campo magnético, $\tilde{\omega}_c$ e ω_c se aproximam e $F(t)$ tende para um.

Então para o GaAs, $\hbar\Omega=2\text{meV}$, o efeito do fator de forma é sentido principalmente na região de campos fracos, como pode ser observado na figura 2.3 onde mostramos o fator de forma $F(t)$, versus t . Quanto menor λ^2 mais $F(t)$ se distancia da reta $F(t)=1$ (2D). Portanto um campo magnético forte destrói o efeito do potencial de confinamento, isto para $\hbar\Omega$ pequeno, e o sistema se torna 2D puro. No entanto à medida que $\hbar\Omega$ cresce e se torna comparável à $\hbar W_{LO}$, ω_c e $\tilde{\omega}_c$ são muito diferentes e

mesmo na região de campos fortes ($\lambda^2 < 1$), elas demoram muito a se aproximarem, de modo a tornarem $\gamma \cong 0$, e o sistema atingir o limite 2D.

Figura 2.2 – Massa ciclônica em função do campo magnético para fios quânticos de InSb, na região abaixo da ressonância ($\lambda_c < 1$). A diferença entre o sistema quase-unidimensional (Q1D) para $\hbar\Omega = 11$ meV e o sistema bi-dimensional (2D) ($\hbar\Omega = 0$) é marcante, não ocorrendo a transição Q1D $\rightarrow$ 2D.

Então o poder de atenuação de $F(t)$ é grande e além disso $\lambda^2 = \hbar\omega_c / \hbar W_{LO}$ é maior que $\lambda_c^2 = \hbar\omega_c / \hbar W_{LO}$, o que faz com que o sistema para alto valor de $\hbar\Omega$ seja bem diferente do bidimensional puro.

Figura 2.3 - Fator de forma $F(t)$ dado pela equação (2.25) em função do parâmetro t , para um fio de GaAs com $\hbar\Omega = 2meV$. Com o crescimento do campo magnético aplicado ($\lambda^2 = \hbar\omega_c / \hbar W_{LO}$), $F(t) \rightarrow 1$, que corresponde ao limite 2D.

2.2.2 Campo magnético forte.

Na região de campos magnéticos intensos $\hbar\omega_c \gg \hbar W_{LO}$, podemos desprezar na expressão (2.9), todos os termos fora da diagonal ($N \neq N'$), pois a principal contribuição neste intervalo é do termo $N=N'$. Teremos assim

$$\Delta E_N(0) = -\frac{\alpha}{2\pi} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2\delta}{\lambda^2}} \left\{ L_N(q^2\delta/\lambda^2) \right\}^2 \int_{-\pi}^\pi \frac{d\phi}{1+\gamma q^2 \cos^2\phi} \quad (2.26)$$

Agora se $\omega_c \rightarrow \infty$, com Ω finito, então, $\omega_c \rightarrow \tilde{\omega}_c$ e $\delta \rightarrow 1$ com $\gamma \cong 1$. Neste limite podemos então escrever,

$$\Delta E_N(0) = -\frac{\alpha}{2\pi} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2\delta}{\lambda^2}} \left\{ L_N(q^2\delta/\lambda^2) \right\}^2 2\pi \quad , \quad (2.27)$$

que é a expressão que tínhamos antes para o caso estritamente 2D [49]. Assim quando $\omega_c \rightarrow \infty$,

$$m_b^* = m_b \left(1 - \frac{\pi^{1/2}\alpha}{2\lambda} \right) \quad (2.28)$$

Como no caso 2D, existem diferenças importantes entre os resultados de campos fortes e fracos. Para campos fortes a massa efetiva é menor que a massa de banda do elétron e desta se aproxima no limite de $\lambda^2 \rightarrow \infty$. Isso quer dizer que para campos tais que $\omega_c > W_{LO}$ a polarização da rede não consegue mais acompanhar o elétron, que oscila muito mais rapidamente que os modos óticos da rede. Nessa região a correção polarônica age no sentido de diminuir a massa efetiva para valores abaixo da massa de banda do elétron.

2.2.3 Região Ressonante

No caso de um fio quântico Q1D com potencial de confinamento parabólico $\hbar\Omega$, a condição de ressonância não será independente deste potencial. Na ressonância ($N\lambda^2=1$), o nível de energia N será degenerado com o nível $N=0$ mais um fonon LO somente se a condição $W_{LO} > N\Omega$ for observada. Caso contrário o cruzamento dos níveis não ocorrerá. Isto acontece porque na ressonância temos,

$$N\tilde{\omega}_c^2 = N(\omega_c^2 + \Omega^2) = W_{LO} \quad (2.29)$$

ou seja,

$$\omega_c = (W_{LO}^2/N^2 - \Omega^2)^{1/2} \quad (2.30)$$

A condição $W_{LO} > N\Omega$ é respeitada pelos fios que usamos até agora em nossos cálculos numéricos, e para aqueles que tem sido fabricados em laboratório.

De volta à equação (2.9), notamos que a principal contribuição para ΔE_N , quando $\lambda^2=1$, vem do termo $N'=0$, pois o denominador neste caso será

$$D_{01} = 1 - \lambda^2 + \gamma q^2 \cos^2 \phi - \Delta_N \quad (2.31)$$

Então,

$$\Delta E_1^{N'=0}(0) = - \left(\frac{\alpha\delta}{2\pi\lambda^2} \right) \int_0^\infty q^2 dq e^{-\frac{q^2\delta}{\lambda^2}} \int_0^\pi \frac{d\phi}{1 - \lambda^2 - \Delta E_1 + \Delta E_0 + \gamma q^2 \cos^2 \phi} \quad (2.32)$$

Realizando a integração angular,

$$\int_0^\pi \frac{d\phi}{a + \gamma q^2 \cos^2 \phi} = \frac{\pi}{\sqrt{a(a + \gamma q^2)}} = \frac{\pi}{a\sqrt{1 + \gamma q^2/a}} \quad (2.33)$$

onde $a = 1 - \lambda^2 - \Delta E_1 + \Delta E_0$. Note-se que $a < 0$, pois $\lambda^2 > 1$. De volta à expressão para $\Delta E_1^{N'=0}$ teremos,

$$\Delta E_1^{N'=0}(0) = - \left(\frac{\alpha \delta}{a \lambda^2} \right) \int_0^\infty q^2 dq e^{-\frac{q^2 \delta}{\lambda^2}} [1 + \gamma q^2 / a]^{1/2} \quad (2.34)$$

Podemos expandir o termo $[1 + \gamma q^2 / a]^{1/2}$ em potências de $(\gamma q^2 / a)$ e a integral pode ser obtida integrando-se termo a termo. A integração em q é simples,

$$\int_0^\infty q^m \exp(q^2 \delta / \lambda^2) dq = \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{2(\delta / \lambda^2)^{(m+1)/2}} \quad (2.35)$$

resultando $\Delta E_1^{N'=0}$ como função apenas de γ e δ e deles dependerá a “truncabilidade” ou não da expansão. Então quando $\lambda^2 = 1$, teremos

$$\Delta E_1^{N'=0}(0) = \frac{\alpha \delta}{a \lambda^2} \left\{ \frac{\pi^{1/2}}{4 \delta^{3/2}} + \frac{3 \pi^{1/2} \gamma}{16 \delta^{5/2} a} + \frac{45 \gamma^2 \pi^{1/2}}{128 \delta^{7/2} a^2} + \dots \right\} \quad (2.36)$$

se $\lambda^2 = 1$, $a = \Delta_1$. Para o GaAs, $0 < \hbar \Omega < 2 \text{ meV}$ e $\hbar W_{LO} = 36.17 \text{ meV}$, de modo que a relação $(\hbar \Omega / \hbar W_{LO})$ é pequena o suficiente para que a expansão até a ordem de γ dê bons resultados. Para $\hbar \Omega = 2 \text{ meV}$, quando $\tilde{\omega}_c = W_{LO}$, teremos $\delta = 0.99847$ e $\gamma = 0.003$, assim

$$\Delta E_1^{N'=0}(0) = \frac{\alpha \delta \pi^{1/2}}{4 \lambda^2 \delta^{3/2}} \frac{1}{a} \quad (2.37)$$

Substituindo $a = \Delta_1$ teremos,

$$\Delta E_1(\Delta E_1 - \Delta E_0) = \frac{\alpha \delta \pi^{1/2}}{4 \lambda^2 \delta^{3/2}} \doteq \frac{\alpha \pi^{1/2}}{4} \quad (2.38)$$

e

$$\Delta E_1 \cong \frac{\Delta E_0}{2} \pm \left(\left(\frac{\Delta E_0}{2} \right)^2 + \frac{\alpha \pi^{1/2}}{4} \right)^{1/2}, \quad (2.39)$$

que é o resultado para a separação (split) da energia $N=1$ na ressonância para um gás de elétrons 2D [49]. Como vemos o split da energia e portanto da massa se dará em dois ramos.

Analisando os resultados até agora obtidos por nós, vemos que para um fio de GaAs a diferença entre os sistemas 2D e Q1D, localiza-se na região de campos magnéticos fracos, sendo o comportamento da massa na ressonância e na região acima dela igual ao caso estritamente 2D.

No caso do InSb, a relação entre $\hbar\Omega$ e $\hbar W_{LO}$ não é tão pequena como para o GaAs, e este fato como vimos na região abaixo da ressonância provoca uma maior distinção entre os sistemas Q1D e 2D. Também para o InSb com $\hbar\Omega=3\text{meV}$ a separação ressonante dos níveis será em dois ramos, mas para $\hbar\Omega=11\text{ meV}$ a separação ressonante dos níveis deverá se dar em pelo menos três ramos bem definidos.

Resumindo, na ressonância a separação dos níveis poderá se dar em dois ou mais ramos, dependendo da relação entre $\hbar\Omega$ e $\hbar W_{LO}$, e o ponto onde ocorre a ressonância é deslocado para a esquerda segundo a relação $\omega_c = \sqrt{W_{LO}^2 - \Omega^2}$. Para obtermos a massa do magnetopolaron na região $\lambda_c^2 > 1$, a transformação dada na equação (2.10) não pode ser efetuada para o termo $N'=0$ ($N=1$), pois o denominador para $K_x=0$ é

$$D_{N'N} = 1 + (N'-N)\lambda^2 + \gamma q^2 \cos^2(\phi) - \Delta_N \quad (2.40)$$

ou seja, D_{01} é menor que zero para $\lambda^2 \geq 1$.

Sendo assim nós usamos para $\Delta E_1^{N'=0}$ a expansão dada na equação (2.36), que será tanto melhor quanto menor for γ , ou seja, quanto menor for o potencial de confinamento $\hbar\Omega$ em relação à $\hbar W_{LO}$. Ela será válida sem dúvida para GaAs com potencial $\hbar\Omega$ até 2meV e para InSb com $\hbar\Omega \leq 3\text{meV}$. Esta validade naturalmente se

refere ao fato de truncarmos a expressão em termos da ordem de γ^2 .

Figura 2.4— Massa ciclôtrônica para um sistema eletrônico Q1D em um fio de GaAs com potencial de confinamento parabólico ($\hbar\Omega=2\text{meV}$, linha tracejada), e para um sistema 2D ($\hbar\Omega=0$) em função do campo magnético. A principal diferença entre os dois sistemas localiza-se na região de campos fracos, a separação ressonante da massa se dá em dois ramos como no caso 2D.

Na figura 2.4 que se segue nós vemos a massa ciclotrônica em função de λ^2 para todo o espectro do campo magnético, abaixo e acima da ressonância, para um fio de GaAs, com potenciais de confinamento $\hbar\Omega=2\text{meV}$ e $\hbar\Omega=0$. Este último corresponde ao limite 2D. As diferenças entre os resultados Q1D e 2D localizam-se na região de campos baixos e para $\lambda_c^2 > 0,30$ os resultados se confundem, como já discutimos anteriormente.

As energias dos dois primeiros níveis de Landau $N=0$ e $N=1$ na presença da interação elétron-fonons LO como função de λ_c^2 , para fios de GaAs e InSb, são mostradas nas figuras 2.5 e 2.6 respectivamente. Em ambas as figuras o resultado bidimensional, $\hbar\Omega=0$, foi incluído para comparação.

Na figura 2.5, para o potencial de confinamento $\hbar\Omega=2\text{meV}$, temos que a razão $[\hbar\Omega/\hbar W_{LO}]$ vale 0,055 e como vemos a diferença com o caso 2D localiza-se na região de campos fracos, onde vemos um pequeno desvio de energia dos níveis $N=0$ e $N=1$.

Também observamos a separação ressonante da energia do nível $N=1$ em dois ramos quando $\lambda^2=1$. É interessante notar que nas vizinhanças de $\lambda_c^2=0,3$ a energia dos dois níveis $N=0$ e $N=1$ são maiores que 0,055 e a partir deste valor de λ_c^2 o sistema se comporta como bidimensional.

Já na figura 2.6 para o InSb com $\hbar\Omega=11\text{meV}$ a fração $\hbar\Omega/\hbar W_{LO}$ é igual a 0,45 e a diferença com o caso 2D ($\hbar\Omega=0$) é grande e se manifesta por toda a região ($\lambda^2 < 1$) abaixo da ressonância. O sistema eletrônico Q1D nessa região não muda para 2D para nenhum valor de λ^2 . A energia do nível $N=0$ é sempre menor que $[\hbar\Omega/\hbar W_{LO}]$ enquanto a energia do nível $N=1$ é sempre maior.

Figura 2.5—Variação dos níveis de energia $N=0$ e $N=1$ em função do campo magnético, para um fio quântico de GaAs com $\hbar\Omega=2\text{meV}$ (linha tracejada) e $\hbar\Omega=0$ (2D, linha sólida). Há um pequeno desvio do resultado Q1D e 2D, na região de campos fracos, por todo o restante do espectro os resultados se confundem.

Figura 2.6— Energia dos níveis $N=0$ e $N=1$ de Landau, para um fio de InSb com $\hbar\Omega=11$ meV (linha tracejada), em função do campo magnético, na região abaixo da ressonância, $\hbar\omega_c < \hbar W_{LO}$. Neste caso as diferenças entre o caso Q1D e 2D (linhas contínuas) são mais marcantes e se manifestam por todo o espectro de campos não ressonantes.

2.3 Conclusão

Neste capítulo nós calculamos a massa efetiva de magnetopolarons presentes em fios quânticos quase-unidimensionais de GaAs e InSb, obtidos por efeito de campo a partir de heteroestruturas de GaAs-AlGaAs e estruturas de metal-óxido-semicondutor de InSb. Consideramos o potencial de confinamento do elétron como sendo infinito na direção z e parabólico na direção y com energia $\hbar\Omega$.

Verificamos que o comportamento da massa efetiva em função do campo magnético é bem diferente daquele para sistemas eletrônicos 2D e 3D. Nestes sistemas a massa efetiva cresce, a partir do valor da massa do polaron, com o campo magnético aplicado em toda a região abaixo da ressonância, sofrendo uma descontinuidade no ponto $\omega_c = W_{LO}$. Para campos magnéticos fortes $\omega_c > W_{LO}$ a massa ciclotrônica é menor que a massa de banda do elétron e desta se aproxima quando $\omega_c \rightarrow \infty$. No caso Q1D verificamos que a massa ciclotrônica na região abaixo da ressonância diminui de valor com o aumento do campo aplicado atingindo um valor mínimo e voltando a crescer novamente. O grau de distinção entre estes sistemas aumenta quanto maior for a relação entre o potencial de confinamento e a energia do fonon LO do material.

Para um fio quântico de GaAs, o potencial de confinamento é pequeno ($\hbar\Omega < 2\text{meV}$) frente a $\hbar W_{LO}$ (36.77meV), de modo que a principal diferença entre os resultados para sistemas Q1D e 2D, localiza-se na região de campos fracos. Para campos magnéticos tais que $\lambda_c^2 > 0,3$, os resultados Q1D e 2D coincidem, ou seja, a energia do campo magnético vence o potencial de confinamento e o elétron se comporta como se estivesse livre (2D).

Já para um fio de InSb, os potenciais de confinamento são maiores ($\hbar\Omega < 12\text{meV}$), de modo que dependendo de $\hbar\Omega$, as diferenças com o caso 2D podem acontecer em toda a região abaixo da ressonância, caso por exemplo de $\hbar\Omega = 11\text{meV}$.

Já para potenciais fracos como $\hbar\Omega=3\text{meV}$ o comportamento da massa do magnetopolaron é similar àquele para o fio de GaAs, porém somente para campos mais altos ($\lambda_c^2=0,6$) se comporta como bidimensional.

De nossas análises do comportamento da energia na região ressonante sugerimos que o número de ramos da separação ressonante da massa para grandes potenciais de confinamento poderia ser maior que dois. Infelizmente não dispomos de resultados experimentais para confrontar com estas previsões teóricas.

CAPÍTULO 3

RESSONÂNCIA CICLOTRÔNICA DE POLARONS INTERFACIAIS EM HETEROJUNÇÕES DE MATERIAIS SEMICONDUCTORES

3.1 Introdução

A maioria dos trabalhos que tratam do acoplamento elétron-fonons óticos em heteroestruturas semicondutoras compostas de materiais polares, só consideram a interação com os fonons longitudinais óticos (LO) do volume (bulk) do material. No entanto os fonons óticos são fortemente influenciados pela presença de interfaces, e o acoplamento do elétron se dará também com os fonons interfaciais.

Wendler [50] e Mori e Ando [51] obtiveram os modos dos fonons óticos utilizando o modelo dielétrico contínuo, bem como as hamiltonianas e os potenciais de acoplamento elétron-fonons, para heterojunções e poços quânticos de materiais semicondutores. Como mostrado por vários autores [52-54] o acoplamento elétron-fonons interfaciais desempenha um papel importante em várias situações, entre as quais na ressonância a interação é fundamental. Por exemplo em experimentos de ressonância ciclotrônica (RC), ocorrerá uma descontinuidade da massa ciclotrônica quando a frequência do campo magnético se aproximar da frequência de cada um dos modos dos fonons óticos.

A maioria dos experimentos de RC são para a heterojunção de GaAs-AlGaAs, e para este sistema nenhuma descontinuidade da massa nas frequências dos fonons interfaciais foi observada. Porém, observações experimentais dos modos interfaciais foram reportados por Sood e co-autores [55] em experimentos de espalhamento Raman e por Lambin e co-autores [56] no espectro de perda de energia de elétrons de alta resolução de super-rêdes de GaAs-AlGaAs.

Alguns trabalhos teóricos [57-59] se preocuparam em examinar a influência da interação elétron-fonons interfaciais sobre a massa ciclotrônica de polarons presentes em heterojunções e poços quânticos semicondutores. No entanto o tratamento dado aos fonons interfaciais nestes trabalhos é incorreto e incompleto.

A proposta aqui é estudar os efeitos dos fonons interfaciais sobre a massa ciclotrônica de elétrons presentes em heterojunções semicondutoras compostas de semicondutores polares diatômicos, não de ligas, embora a maioria dos experimentos já realizados sejam para sistemas semicondutores constituídos por ligas (por exemplo: GaAs-AlGaAs InGaAs-InAlAs, etc.).

Este capítulo é organizado da seguinte forma: na seção 3.2 calculamos os deslocamentos dos níveis de energia devido ao acoplamento elétron-fonons óticos, através da teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brillouin (IWBPT), que é conveniente no caso de acoplamento fraco, e na seção 3.3 apresentamos e discutimos os resultados, para as heterojunções de GaAs-AlAs e GaAs-GaSb. Efeitos de blindagem pelos portadores livres e de não-parabolicidade das bandas de condução, não são considerados.

3.2 Desenvolvimento Teórico.

Considere a heterojunção formada por dois cristais polares 1 e 2, que preenchem respectivamente os semi-espacos $z > 0$ e $z < 0$. Cada meio é caracterizado pela constante dielétrica,

$$\epsilon_n(\omega) = \epsilon_{\infty n} \frac{(W_{Ln}^2 - \omega^2)}{(W_{Tn}^2 - \omega^2)} \quad (3.1)$$

onde W_{Ln} (W_{Tn}) é a frequência dos fonons longitudinais (transversais) óticos do material n ($n=1$, ou $n=2$), com constantes dielétrica ótica $\epsilon_{\infty n}$ e estática ϵ_{0n} . A este sistema é aplicado um campo magnético B , uniforme, na direção perpendicular à interface entre os meios, direção z .

A hamiltoniana para um elétron da banda de condução do material 1, interagindo com os fonons longitudinais óticos (LO) do volume e com os fonons óticos interfaciais pode ser escrita na forma:

$$H = H_0 + H_1 \quad (3.2)$$

onde H_0 é a hamiltoniana de um elétron no material 1, sob a ação de um campo magnético uniforme, mais a hamiltoniana do sistema de fonons livres, ou seja,

$$H_0 = \frac{1}{2m_b} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(z) + \sum_{\vec{Q}} \hbar W_{L1} a_{\vec{Q}}^\dagger a_{\vec{Q}} + \sum_{j=1}^2 \sum_{\vec{Q}} \hbar W_{Ij} b_{\vec{Q}_j}^\dagger b_{\vec{Q}_j} \quad (3.3)$$

sendo $V(z)$ o potencial de confinamento do elétron de momento $\vec{P}$, coordenadas $\vec{r}=(\rho, z)$

e massa de banda m_b . Os fonons LO do volume do material 1, possuem energia $\hbar W_{L1}$ e operadores criação (destruição) $a_{\vec{Q}}^{\dagger}$ ($a_{\vec{Q}}$). O vetor de onda dos fonons é $\vec{Q}=(\vec{q}, q_z)$ e W_{ij} é a frequência dos fonons interfaciais, que satisfazem a relação de dispersão, $\epsilon_1(W_{ij}) + \epsilon_2(W_{ij}) = 0$, os índices $j=1$ e $j=2$ denotam $(W_{11} = \omega_-)$ e $(W_{12} = \omega_+)$, os dois modos dos fonons interfaciais. Ainda $b_{\vec{q}_j}^{\dagger}$ ($b_{\vec{q}_j}$) são os operadores criação (destruição) destes fonons. $\vec{A}$ é o potencial vetor magnético, tomado no calibre de Landau.

A interação do elétron com os diferentes modos de fonons óticos é dada por H_1 , que é,

$$H_1 = H_{e-LO} + H_{e-IO} \quad (3.4)$$

onde,

$$H_{e-LO} = \sum_{\vec{Q}} [V_{\vec{Q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} \sin(q_z z) a_{\vec{Q}} + \text{h.c}] \quad (3.5)$$

e

$$H_{e-IO} = \sum_{j=1}^2 \sum_{\vec{q}} [\Gamma_{\vec{q}}^j e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} e^{-q_z z} b_{\vec{q}_j} + \text{h.c}] . \quad (3.6)$$

O potencial de acoplamento elétron-fonon LO é dado por,

$$V_{\vec{Q}} = -\frac{i}{Q} \left(\frac{4\pi e^2}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right) \hbar W_{L1} \right)^{1/2} \quad (3.7)$$

e o potencial de acoplamento elétron-fonon interfacial j , por

$$\Gamma_{\vec{q}} = -\frac{i\hbar W_{ij}}{\sqrt{q}} \left(\frac{2\pi}{S} \alpha_j r_{Pj} \right)^{1/2} \quad (3.8)$$

sendo V o volume e S a área do sistema. Ainda α_j é a constante de acoplamento

elétron-fonons interfaciais e r_{pj} o raio do polaron interfacial, definidos como,

$$\alpha_j = \left(\frac{e^2}{\hbar W_{lj} r_{pj}} \right) \left\{ \frac{W_{lj}^2}{\omega_{p1}^2} (\epsilon_1(W_{lj}) - 1)^2 \theta_1(W_{lj}) + \frac{W_{lj}^2}{\omega_{p2}^2} (\epsilon_2(W_{lj}) - 1)^2 \theta_2(W_{lj}) \right\}^{-1} \quad (3.9)$$

e

$$r_{pj} = \left(\frac{\hbar}{2m_b W_{lj}} \right)^{1/2} \quad (3.10)$$

A frequência de plasma dos íons ω_{pn} e a função $\theta_n(\omega)$ são definidos como,

$$\omega_{pn}^2 = \left(9 \epsilon_{\infty n} \frac{(W_{Ln}^2 + W_{Tn}^2)}{(\epsilon_{\infty 2} + 2)^2} \right) \quad (3.11)$$

e

$$\theta_n(\omega) = \left(1 + \frac{\epsilon_{on}}{3\epsilon_{\infty n}} \frac{(\epsilon_{\infty n} - 1)(\epsilon_{\infty n} + 2)}{(\epsilon_{on} - \epsilon_{\infty n}) W_{Ln}^2} (\omega_{on}^2 - \omega^2) \right)^{-2} \quad (3.12)$$

com

$$\omega_{on}^2 = \left(W_{Ln}^2 - \frac{2(W_{Ln}^2 - W_{Tn}^2)}{\epsilon_{\infty n} + 2} \right) \quad (3.13)$$

O acoplamento elétron-fonons desloca a energia do elétron no nível de Landau N , $E_N = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$, onde $\omega_c = (eB/m_b)$ é a frequência de cíclotron do elétron, de uma quantidade ΔE_N , que no regime de acoplamento fraco pode ser calculada através da teoria de perturbação (TP) de segunda ordem. Como é sabido a TP a ser usada, deve ser a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT), que descreve corretamente o efeito 'pinning' dos níveis ($N \geq 1$). Desse modo teremos,

$$\Delta E_N = - \sum_j \sum_{M=0}^{\infty} \frac{|\langle \psi_{M, k_y - q_y} | H_1 | \psi_{N, k_y} \rangle|^2}{\hbar W_j - (N-M)\hbar\omega_c - \Delta_N} \quad (3.14)$$

onde a soma sobre j , envolve todos os três tipos de fonons de frequência $\hbar W_j$. O termo da energia Δ_N , na IWBPT vale, $\Delta_N = \Delta E_N - \Delta E_0$, onde ΔE_0 é calculado pela teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger (RSPT).

A autofunção da hamiltoniana H_0 não perturbada é,

$$|\psi_{N, k_y}\rangle = |N, k_y, \xi(z); |0\rangle_{LO}; |0\rangle_{IO}\rangle \quad (3.15)$$

onde $|N\rangle = u_N(x - k_y l^2)$ é a função de onda de um oscilador hamônico com centro deslocado de $k_y l^2$, com $l^2 = \hbar/eB$ o raio da órbita clássica de Landau; $|k_y\rangle = e^{ik_y y}$ é a função de onda do elétron livre na direção y ; $\xi(z)$ é a função de onda eletrônica na direção normal à interface e $|0\rangle_{LO}$ e $|0\rangle_{IO}$ denotam os vácuos dos fonons LO do material 1 e dos fonons interfaciais óticos. Uma conveniente função de onda variacional para o estado fundamental do sistema é aquela de Fang e Howard [2],

$$\xi(z) = \begin{cases} (b^3/2)^{1/2} z e^{-bz/2} & z \geq 0 \\ 0 & z \leq 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

onde o parâmetro variacional b é obtido minimizando-se a energia da subbanda mais baixa e depende da densidade de carga na camada de depleção N_d e da densidade eletrônica N_s , da seguinte forma [2],

$$b = \left(\frac{48\pi m_b e^2 N^*}{\epsilon_{01} \hbar} \right)^{1/3} \quad (3.17)$$

com

$$N^* = N_d + \frac{11}{32} N_s \quad (3.18)$$

Portanto, podemos escrever a equação (3.14) da forma,

$$\begin{aligned} \Delta E_N = & - \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{\vec{q}} \frac{|V_Q|^2 |V_{NM}(q)|^2 |F_B(q_Z)|^2}{\hbar W_{LO} - (N-M)\hbar\omega_C - \Delta_N} + \\ & - \sum_{j=1}^2 \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{\vec{q}} \frac{|\Gamma_q|^2 |V_{NM}(q)|^2 |F_q(q)|^2}{\hbar W_{Lj} - (N-M)\hbar\omega_C - \Delta_N} \quad , \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde

$$V_{NM}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, u_N(x - k_y l^2 + q_y l^2) e^{-iq_x x} u_N(x - k_y l^2) \quad , \quad (3.20)$$

$$F_B(q_Z) = \int_0^{\infty} \xi^*(z) \sin(q_Z z) \xi(z) dz \quad , \quad (3.21)$$

e

$$F_q(q) = \int_0^{\infty} \xi^*(z) e^{-qz} \xi(z) dz \quad . \quad (3.22)$$

No primeiro termo da equação (3.19) realizando a soma (integração) sobre q_Z teremos que,

$$F_H = \sum_{q_Z} |F_B(q_Z)|^2 = \int_0^{\infty} dz \int_0^{\infty} dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 (e^{-q|z-z'|} - e^{-|z+z'|}) = F(q) - F_I(q) \quad (3.23)$$

onde

$$F(q) = \int_0^{\infty} dz \int_0^{\infty} dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 e^{-q|z-z'|} \quad (3.24)$$

é o fator de forma quase-bidimensional (Q2D), que aparece quando se considera somente a interação do elétron com os fonons do volume (bulk), ver equação (1.28), e

$$F_I(q) = \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 e^{-|z+z'|} = \frac{b^6}{(b+q)^6} \quad (3.25)$$

é o fator de forma para os fonons interfaciais. Na figura 3.1 mostramos esses fatores de forma em função de (q/b) . O parâmetro variacional b está associado com a extensão da camada eletrônica, Z_0 , pela relação $b=3/Z_0$, no caso estritamente bidimensional (2D), $Z_0=0$, logo $b \rightarrow \infty$. Neste limite $(q/b) \rightarrow 0$ e $F(q)$ e $F_I(q)$ vão para a unidade com $F_H(q) \rightarrow 0$. Por outro lado quando $(q/b) \rightarrow \infty$, F_I cai exponencialmente a zero e F_H se aproxima de F . É interessante notar que a regra da soma dos fatores de forma dada na equação (3.23), estabelece que a soma das contribuições de todas as espécies de fonons é exatamente igual à aquela dos modos do volume [51].

Na equação (3.20) realizando a integração na variável x , teremos

$$|V_{NM}(q)|^2 = \frac{n_2!}{n_1!} e^{-\frac{q^2 l^2}{2}} \left(\frac{q^2 l^2}{2}\right)^{n_1-n_2} \{L_{n_2}^{n_1-n_2}(q^2 l^2/2)\}^2 \quad (3.26)$$

onde $n_2 = \min(N, M)$, $n_1 = \max(N, M)$ e $L_n^K(x)$ é o polimônio associado de Laguerre. Com esses resultados anteriores, a equação (3.19) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Delta E_N = & -\alpha \int_0^\infty du F_H(u) \sum_{M=0}^\infty \frac{|V_{NM}(u)|^2}{1-(N-M)\lambda^2 - \Delta_N} + \\ & - \sum_{j=1}^2 \alpha_j \left(\frac{\hbar W_{Lj}}{\hbar W_{L1}}\right) \int_0^\infty du_j F_I(u_j) \sum_{M=0}^\infty \frac{|V_{NM}(u_j)|^2}{1-(N-M)\lambda_{Lj}^2 - \Delta_N \left(\frac{\lambda_{Lj}^2}{\lambda^2}\right)} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Na expressão (3.27) as energias estão em unidades de $\hbar W_{L1}$, os comprimentos em unidades do raio do polaron LO,

$$r_P = \left(\frac{\hbar}{2m_b W_{L1}}\right)^{1/2} \quad (3.28)$$

e

$$\lambda^2 = \frac{\hbar \omega_c}{\hbar W_{L1}} ; \lambda_j^2 = \frac{\hbar \omega_c}{\hbar W_{Lj}} ; u = q r_p \text{ e } u_j = q r_{pj} .$$

Figura 3.1— Fatores de Forma F_H , F_I e F em função de q/b , onde b é o parâmetro variacional de Fang e Howard equação (3.17).

A massa ciclôtrônica do polaron é obtida como no capítulo 2, equação (2.10), a partir das transições óticas entre os níveis $N=0$ e $N=1$ da subbanda mais baixa. Então,

$$m^* = m_b \left\{ 1 + \frac{\Delta E_1 - \Delta E_0}{\lambda^2} \right\}^{-1} \quad (3.29)$$

O deslocamento de energia ΔE_N pode ser separado em três termos,

$$\Delta E_N = \Delta E_N^{LO} + \Delta E_N^{I_1} + \Delta E_N^{I_2} \quad (3.30)$$

cada um deles devido a um tipo diferente de fonon, um modo LO do volume do material 1 e dois modos interfaciais. Para os fonons LO os deslocamentos dos níveis de Landau $N=0$ e $N=1$ são dados por.

$$\Delta E_0^{LO} = -\alpha \int_0^\infty du \int_0^\infty dt e^{-t} F_H(u) e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}(1-e^{-t\lambda^2})}, \quad (3.31)$$

$$\Delta E_1^{LO} = -\alpha \left\{ \int_0^\infty du \int_0^\infty dt e^{-t(1-\Delta_1)} F_H(u) G(u) + \int_0^\infty du e^{-(u^2/\lambda^2)} F_H(u) \frac{u^2/\lambda^2}{1+\lambda^2+\Delta_1} \right\}, \quad (3.32)$$

onde

$$G(u) = \exp\left(-\frac{u^2}{\lambda^2}(1-e^{-t\lambda^2})\right) \left\{ 1 + \frac{u^2}{\lambda^2 e^{-t\lambda^2}} (e^{-t\lambda^2} - 1)^2 \right\} - \frac{u^2 e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}}}{\lambda^2 e^{-t\lambda^2}} \quad (3.33)$$

Para obter as outras duas contribuições, dos fonons interfaciais, basta fazermos nas equações acima as seguintes substituições:

$$\lambda^2 \rightarrow \lambda_j^2 \quad u \rightarrow u_j \quad \Delta_N \rightarrow \Delta_N \frac{\lambda_j^2}{\lambda^2} \quad F_H \rightarrow F_I \quad (3.34)$$

Se na equação (3.27) fizermos $F_I(q) = 0$, então da regra de soma vemos que $F_H(q) = F(q)$, e esta equação nos dará o deslocamento da energia dos níveis de Landau, devido à interação do elétron com os fonons LO do volume (bulk) do material 1, obtido a partir da hamiltoniana de Fröhlich. O efeito do fator de forma Q2D, $F(q)$, é o de atenuar a interação elétron-fonons em comparação com o caso estritamente 2D ($F(q)=1$), sem contudo alterar qualitativamente o comportamento da massa do

magnetopolaron. Neste caso em particular (2D) o comportamento da massa ciclotrônica em função do campo magnético é bem conhecido e já foi estudado por nós no Capítulo 2 ($\hbar\Omega=0$) para as regiões de campos fracos, fortes e ressonantes. Nesta última região, quando $\omega_c \rightarrow W_{L1}$, a contribuição dominante para ΔE_N é do termo $M=0$ e verificamos a separação ressonante da energia do nível $N=1$ em dois ramos, equação (2.39), provocando uma descontinuidade da massa efetiva ciclotrônica à medida que cruzamos o ponto $\omega_c = W_{L1}$.

Ocorre então uma mudança de sentido da correção polarônica sobre a massa do elétron antes e depois da ressonância. A campos fracos essa correção age no sentido de aumentar a massa de banda do elétron, enquanto que a campos fortes ela diminui a massa efetiva para valores abaixo daquele para a massa de banda.

A principal diferença na expressão do deslocamento de energia, equação (3.27), com $F_1 \neq 0$, em relação a este caso ($F_1=0$), é o aparecimento das duas frequências de ressonância dos fonons interfaciais. Teremos então três frequências de ressonância ocorrendo nos pontos,

$$\omega_c = W_{L1} \quad , \quad \omega_c = W_{I1} \quad e \quad \omega_c = W_{I2} \quad (3.35)$$

e a posição destes picos dependerá das características físicas dos materiais que compõem a heterojunção.

A contribuição predominante para ΔE_1 na ressonância é do termo $M=0$ na equação (3.27), portanto,

$$\Delta E_1^{M=0} = \frac{-\alpha}{1-\Delta_1-\lambda^2} \int_0^\infty dq F_H(q) |V_{10}(q)|^2 - \sum_{j=1}^2 \frac{\alpha_j \delta_j}{1-\Delta_1 \delta_j - \lambda_j^2} \int_0^\infty dq F_I(q) |V_{10}(q)|^2 \quad (3.36)$$

com

$$\delta_j = (\lambda^2 / \lambda_j^2).$$

Se as frequências dos vários tipos de fonons estiverem distantes entre si, então à medida que ω_c se aproximar da frequência de um destes fonons, poderemos desprezar a contribuição dos outros modos, e assim a equação para ΔE_1 acima, será uma equação do segundo grau e, a separação ressonante se dará em dois ramos, equação (2.39).

Por outro lado quando dois modos dos fonons possuírem frequências próximas, por exemplo $W_{L1} \approx W_{I1}$, a interação do elétron poderá se dar com qualquer um deles. Então as contribuições ressonantes dos dois modos devem ser consideradas juntas, resultando da equação (3.36) em uma equação cúbica para ΔE_1 . Dessa forma a separação ressonante da massa se dará em três ramos. Será então nas regiões próximas às frequências de ressonância onde a interação elétron-fonons interfaciais se mostrará mais importante e impossível de ser desprezada. Na próxima seção apresentamos nossos resultados numéricos para a massa ciclotrônica do polaron presente em duas heterojunções à base de GaAs (material 1).

3.3 Resultados

Nossos resultados numéricos são para as heterojunções de GaAs–GaSb e GaAs–AlAs com uma densidade eletrônica típica $N_s = 10^{11} \text{cm}^{-2}$ localizada no GaAs, material 1. Consideramos a densidade de carga na camada de depleção N_d como sendo nula. Os parâmetros físicos dos materiais que usamos são,

$$\begin{aligned} \text{GaAs} \quad \epsilon_0 &= 12,83 \quad \epsilon_\infty = 10,90 \quad W_{L1} = 295,8 \text{cm}^{-1} \quad W_{T1} = 272,64 \text{cm}^{-1} \\ \text{GaSb} \quad \epsilon_0 &= 15,69 \quad \epsilon_\infty = 14,44 \quad W_{L2} = 240,19 \text{cm}^{-1} \quad W_{T2} = 230,42 \text{cm}^{-1} \\ \text{AlAs} \quad \epsilon_0 &= 10,20 \quad \epsilon_\infty = 8,160 \quad W_{L2} = 404,03 \text{cm}^{-1} \quad W_{T2} = 361,29 \text{cm}^{-1} \end{aligned}$$

As frequências dos fonons interfaciais e as constantes de acoplamento elétron-fonons

interfaciais para as duas heterojunções são:

a) Heterojunção de GaAs–GaSb

$$W_{I1} = 238,08 \text{ cm}^{-1} \quad \alpha_1 = 0,034856; \quad W_{I2} = 281,13 \text{ cm}^{-1} \quad \alpha_2 = 0,01960$$

b) Heterojunção de GaAs–AlAs

$$W_{I1} = 283,24 \text{ cm}^{-1} \quad \alpha_1 = 0,029878; \quad W_{I2} = 382,33 \text{ cm}^{-1} \quad \alpha_2 = 0,053611$$

ainda para o GaAs tomamos a constante de acoplamento elétron-fonons LO, α , como sendo igual a 0,068.

Na figura 3.2 vemos a variação da massa do magnetopolaron em função do parâmetro $\lambda^2 = (\hbar\omega_c / \hbar W_{L1})$ para a heterojunção de GaAs–GaSb. A linha tracejada representa o caso onde desprezamos a interação eletron-fonons interfaciais ($F_I=0$) e consideramos apenas a interação eletron-fonons LO do volume (bulk) do GaAs, via hamiltoniana de Fröhlich. Estes resultados aparecem nas figuras para uma avaliação do erro cometido ao se desprezar a interação do elétron com os fonons interfaciais.

Para estes dois materiais vemos que a frequência do fonon interfacial W_{I1} está bem distante das outras duas e como esperado podemos observar na figura 3.2 uma descontinuidade da massa ciclotrônica em dois ramos na região próxima à frequência do fonon W_{I1} . Note que esta primeira ressonância ocorre em algum valor de λ^2 maior que 0,83, que corresponde a $\lambda_1^2=1,03$. Esperaríamos encontrar essa ressonância um pouco antes no ponto onde $\lambda_1^2=1$, que corresponde a $\lambda^2=0,805$, mas como constatamos ela sofre um deslocamento para direita.

As frequências do fonon interfacial I_2 e do fonon LO estão muito próximas no caso da heterojunção de GaAs–GaSb. A diferença entre elas é de $14,67 \text{ cm}^{-1}$ ($1,82 \text{ meV}$). Os pontos ressonantes isolados desses fonons deveriam ocorrer em $\lambda^2=0,95$ e $\lambda^2=1$ respectivamente. No entanto o que notamos da figura 3.2 é que há uma

descontinuidade da massa para λ^2 maior que 0,96 e para valores maiores do que $\lambda^2=1$ a massa apresenta valores menores que a massa de banda do elétron no GaAs. A região ressonante entre 0,96 e 1,00 não é acessível através da avaliação numérica da equação (3.27). Uma melhor descrição do polaron ressonante poderia ser obtido através de um tratamento mais rigoroso como aquele feito por Larsen [12].

Figura 3.2 – Massa efetiva do magnetopolaron presente em uma heterojunção de GaAs–GaSb com densidade eletrônica $N_s=10^{11}/\text{cm}^2$ e $N_d=0$, em função de λ^2 , para todo o espectro de campos magnéticos aplicados. As linhas cheias são os resultados considerando a interação dos elétrons com os fonons interfaciais. As linhas tracejadas consideram apenas a interação elétron–fonons LO do volume do GaAs.

Figura 3.3 – Separação ressonante em três ramos da massa ciclotrônica de um polaron presente em uma heterojunção de GaAs–GaSb.

Neste trabalho nos restringimos a uma solução aproximada do problema, obtida da avaliação numérica da equação (3.36). Como $\hbar W_{L1}=1,052 \hbar W_{L2}$ nenhum destes dois modos pode ser desprezado para a interação ressonante com o elétron, de modo que nesta região a separação ressonante da massa deverá se dar em três ramos, como mostrado em detalhes na figura 3.3 acima. Há o aparecimento de um ramo extra entre os dois já conhecidos que tem uma propriedade diferente, ele passa da região onde $m^* < m_b$ para outra $m^* > m_b$ através do ponto $m^*=m_b$. A região ressonante está ampliada para maior clareza. Como vemos de novo o ponto ressonante se deslocou para a direita de $0,95 \rightarrow 0,96$.

A massa efetiva do magnetopolaron versus λ^2 para a heterojunção de GaAs-AlAs é mostrada na figura 3.4. Para esses materiais as ressonâncias deveriam ocorrer em $\lambda^2=0,9575$, $\lambda^2=1$ e $\lambda^2=1,293$, respectivamente nas frequências dos fonons interfaciais I_1 , LO e I_2 . Como podemos notar nesse caso é I_1 que tem a frequência próxima à do modo LO e I_2 está isolado na região $\omega_c > W_{L1}$.

Na figura a primeira descontinuidade observada da massa ocorre muito próxima de $\lambda^2=1$, sendo o último ponto no gráfico $\lambda^2=0,97$, de novo observamos um deslocamento do ponto de ressonância, para a direita e a região ressonante é mais estreita que para o caso anterior, ela situa-se no intervalo entre 0,97 e 1, mas de modo geral o comportamento da massa é similar àquele retratado na figura 3.2. Na região de campos magnéticos fortes, $\omega_c > W_{L1}$, nós encontramos uma descontinuidade da massa próxima do ponto $\lambda^2=1,2$, devido ao acoplamento elétron-fonon interfacial I_2 . Como este modo está isolado, a separação ressonante se dá em dois ramos. É interessante notar que agora o ponto ressonante se deslocou para a esquerda, em vez da ressonância ocorrer em $\lambda^2=1$, ocorreu em $\lambda^2=0,93$. A questão então é explicar o porque deste deslocamento das frequências de ressonância?

Nós sabemos que a correção polarônica da energia do elétron devido a um determinado modo de fonon, muda de sentido ao cruzarmos seu ponto de ressonância.

Figura 3.4 – Massa efetiva do magnetopolaron presente em uma heterojunção de GaAs–AlAs com densidade eletrônica $N_s=10^{11}/\text{cm}^2$ e $N_d=0$, em função de λ^2 , para todo o espectro de campos magnéticos aplicados. As linhas cheias são os resultados considerando a interação dos elétrons com os fonons interfaciais e LO. A linha tracejada considera apenas a interação elétron–fonons LO do volume do GaAs.

Antes da ressonância essa correção ΔE_1^j é negativa e acima se torna positiva. Agora neste nosso caso o deslocamento de energia é composto de três termos,

$$\Delta E_N = \Delta E_N^{LO} + \Delta E_N^{I_1} + \Delta E_N^{I_2}$$

e, a ressonância ocorre para o modo j no ponto

$$\lambda_j^2 = 1 - \frac{\Delta E_1 - \Delta E_0}{\delta_j}.$$

Assim o ponto de ressonância se desloca devido à contribuição dos outros modos.

Por exemplo para GaAs–GaSb, ΔE_1^{LO} e $\Delta E_1^{I_2}$, puxam para a direita o primeiro ponto ressonante, pois quando $\omega_c \rightarrow W_{I_1}$ a correção polarônica para a energia do elétron devido a esses dois modos é negativa. Para o GaAs–AlAs quando $\lambda^2 \cong 1,2$, ou seja, acima de $\lambda^2=1$ as correções $\Delta E_1^{I_1}$ e ΔE_1^{LO} são positivas, já passamos suas frequências de ressonância, então elas antecipam a ressonância que deveria ocorrer em $\lambda^2 \cong 1,3$. Do mesmo modo para GaAs–GaSb, quando $\omega_c \cong W_{I_2}$, a correção $\Delta E_1^{I_1}$ é positiva e atenua o deslocamento para a direita devido ao fonon LO. Estes deslocamentos das frequências de ressonâncias são alguns dos resultados interessantes e ainda não observados experimentalmente que obtivemos.

Da figura 3.4 podemos avaliar a importância de se levar em conta a interação do elétron com os fonons interfaciais ($F_I \neq 0$) para a heterojunção GaAs–AlAs. Como vemos, os resultados com $F_I=0$, que considera somente a interação com os fonos LO do volume, e F_I diferente de zero, na região $\omega_c < W_{L1}$ se confundem e na região acima de $\hbar W_{L1}$ o resultado com $F_I=0$ se afasta bastante daquele com $F_I \neq 0$, comportando-se como uma linha média entre os dois ramos descontínuos. Na figura 3.1 para a heterojunção de GaAs–GaSb as coisas se invertem e o modelo com $F_I=0$ se afasta pouco daquele com $F_I \neq 0$ na região de campos magnéticos fortes, $\omega_c > W_{L1}$ e funciona praticamente como uma linha média na região de campos tais que $\omega_c < W_{L1}$.

Está claro destes resultados que a contribuição dos fonons interfaciais é

indispensável nas regiões próximas às ressonâncias, onde domina o espectro. Para a heterojunção de GaAs-AlAs, como $\hbar W_{II} = \hbar W_{L1}$, na região $\omega_c < W_{L1}$, onde geralmente são feitas as medidas experimentais essa contribuição pode ser desprezada e podemos considerar somente a interação do elétron com os fonons LO do volume (bulk) do GaAs, via hamiltoniana de Fröhlich, que será uma boa aproximação.

Em resumo neste Capítulo investigamos os efeitos da interação elétron-fonons interfaciais sobre a massa ciclotronica de polarons presentes em heterojunções semicondutoras compostas de materiais polares. Verificamos que este tipo de acoplamento é fundamental perto das frequências de ressonâncias dos modos interfaciais e dependendo das posições desses pontos em relação à frequência dos fonons LO do volume do GaAs a separação ressonante da massa pode se dar em dois ou três ramos. Também constatamos que as frequências de ressonância sofrem um deslocamento em relação ao seu ponto original devido à ação dos outros modos.

Para a heterojunção de GaAs-AlAs na região abaixo da ressonância $\omega_c < W_{L1}$ desprezar a interação com os fonons interfaciais e considerar somente a interação do elétron com os fonons LO do bulk do GaAs, via hamiltoniana de Fröhlich, produz bons resultados.

CAPÍTULO 4

EFEITO DO CAMPO MAGNÉTICO SOBRE A ENERGIA DE LIGAÇÃO DO ESTADO
FUNDAMENTAL DE UM ELÉTRON LIGADO À UMA IMPUREZA DOADORA
HIDROGENÓIDE EM UM PONTO QUÂNTICO CIRCULAR DE
GaAs-AlGaAs.

4.1 Introdução

Nos anos recentes tem crescido bastante o interesse nas propriedades de elétrons confinados em estruturas semicondutoras quase-zero-dimensionais (QZD), os pontos quânticos (quantum dots), onde os elétrons são confinados nas três dimensões espaciais. Geralmente estas estruturas são fabricadas a partir do confinamento eletrostático de um gás de elétrons quase-bidimensional presente em heteroestruturas de GaAs-AlGaAs [41] e de metal-óxido-semicondutor (MOS) de InSb [8], mas também podem ser produzidos através dos processos de corrosão química, que são capazes de produzir colunas circulares de aproximadamente 500 angstroms de diâmetro, a partir de poços quânticos de crescidos por epitaxia por feixe molecular (MBE) [60].

Como consequência do confinamento os níveis de energia do QD são discretos e esta é a razão porque eles são tão interessantes. Eles formam uma nova classe de estruturas artificiais similares aos átomos, são chamados de átomos artificiais, mas com energias de excitação de várias ordens de magnitude menores que os átomos tradicionais e cujo número de elétrons podem ser controlados.

Muitos trabalhos teóricos e experimentais foram realizados com o intuito de investigar as propriedades do gás de elétrons quase-zero-dimensional presente em estruturas de pontos quânticos. A absorção de luz infra-vermelha por um sistema de QD de InSb, foi medida em experimentos por Sikorski e Merckt [8] que encontraram o surpreendente resultado de que as frequências de ressonância não dependiam do número de elétrons no QD, indicando que o espectro de excitação não era influenciado pela interação elétron-elétron. Peeters [61] e Li e co-autores [62] confirmaram estes fatos através de cálculos teóricos para um QD com potencial de confinamento parabólico.

Efeitos polarônicos sobre o gás de elétrons QZD foram investigados por Degani e Farias [47], levando em consideração a interação dos elétrons com os fonons do volume

e da interface. W. Que calculou a energia de excitons em QD parabólicos [63] e o espectro de energia de QD circulares com paredes impenetráveis na presença de um campo magnético aplicado, foram discutidos por Geerinckx e co-autores [64], que compararam seus resultados com aqueles para QD com potencial de confinamento parabólico. Também a energia de ligação de uma impureza doadora hidrogenóide localizada no centro de um QD esférico com barreiras de potencial infinitas foi recentemente calculada por C. M. Hsiao e co-autores [65]. Eles verificaram que variando o raio do QD, a intensidade da interação Coulombiana varia com a dimensão do sistema, passando de tridimensional para quase-zero-dimensional, uma mudança drástica.

Neste trabalho nós obtemos a energia de ligação do estado fundamental de uma impureza doadora hidrogenóide localizada no centro de um QD circular de GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, colocado em um campo magnético perpendicular ao plano do disco, considerando várias alturas das barreiras de potenciais. Na ausência de campo magnético aplicado, nós obtemos soluções analíticas para a função de onda do elétron-ligado e determinamos as energias através das condições de contorno, resolvendo as equações transcendentes resultantes. Para campos não nulos no entanto, usamos o método variacional para determinarmos a energia de ligação.

4.2 Modelo teórico.

Considere um ponto quântico (QD, Quantum Dot) de GaAs envolvido por $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, na forma de um disco bidimensional, no plano (x,y), que possui uma impureza doadora, modelada como hidrogenóide, localizada no seu centro. Neste sistema aplica-se um campo magnético uniforme $\vec{B}$ na direção perpendicular ao plano do disco.

Na aproximação de massa efetiva a hamiltoniana de um elétron ligado à impureza doadora, tem a seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2m_b(r)} (\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} + V(r) \quad , \quad (4.1)$$

onde a posição do elétron e seu momento são denotados por $\vec{r}=(x,y)$ e $\vec{P}=(P_x,P_y)$. A quantidade $m_b(r)$ é a massa efetiva de banda do elétron, que é diferente nos dois semicondutores, em unidades da massa do elétron livre, ela vale $m_1=0,067$ para o GaAs e $m_2= 0,067 + 0,083 x$ para o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. ϵ_0 é a constante dielétrica estática do GaAs que é considerada como sendo a mesma para os dois materiais. O potencial vetor magnético $\vec{A}$ é escolhido na forma simétrica como $\vec{A} = \frac{B_0}{2} (-y, x, 0)$. O potencial de confinamento lateral do elétron no QD de raio b, tem a seguinte forma,

$$V(r)=\begin{cases} 0 & r < b \\ V_0 & r > b \end{cases} \quad (4.2)$$

onde V_0 , a altura da barreira de potencial, é obtida como sendo de 60% da diferença entre as energias dos 'gaps' dos dois semicondutores, ΔE_g , que é definida como,

$$\Delta E_g = 1047 x + 470 x^2 \text{ (meV)} \quad (4.3)$$

sendo x a concentração de alumínio na liga de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Para o nosso problema o sistema de coordenadas polares é o mais conveniente para escrevermos a hamiltoniana. Assim temos

$$H = \delta(r) \left\{ - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\gamma^2}{4} r^2 + \gamma L_z \right\} + V(r) - \frac{2}{r} \quad , \quad (4.4)$$

onde o raio de Bohr efetivo ($a_0^* = 98,69 \text{ \AA}$) e o Rydberg efetivo ($Ry^* = 5,83 \text{ meV}$), ambos para o GaAs, foram usados para tornar adimensionais as unidades de comprimento e energia. A função passo $\delta(r)$, que vale 1 quando $r < b$ e $\delta = m_1/m_2$ para $r > b$, expressa o fato do elétron estar dentro ou fora do QD. L_z é o momento angular na direção z em unidades de $\hbar$, $L_z = -i(\frac{\partial}{\partial \theta})$ e $\gamma = (\hbar\omega_c/2)$ é a metade da energia do campo magnético (em unidades de Ry^*), e o campo magnético $B(T)$ em tesla é igual a $6,65 \gamma$.

A equação de Schrödinger independente do tempo com a hamiltoniana H , só pode ser resolvida exatamente na ausência de campo magnético aplicado, isto é $\gamma = 0$. No caso de $\gamma \neq 0$ nós empregamos o método variacional para obter a energia de ligação do estado fundamental da impureza e estudarmos o efeito do campo magnético sobre ela. Começamos tratando primeiramente o caso sem campo magnético aplicado, pois a solução deste problema será de grande valia para o passo seguinte que é o de acrescentar o campo magnético aos cálculos. Pelo que sabemos até o presente momento em que escrevemos este trabalho uma solução exata deste caso ($\gamma = 0$) para um sistema bidimensional com altura das barreiras de potenciais finitas e infinitas, não se encontra publicado na literatura. Encontramos apenas solução para o caso de uma caixa esférica com barreiras de potenciais infinitas [65].

4.2.1 Campo magnético nulo: Solução exata.

A equação de Schrödinger para o nosso sistema na ausência de campo magnético aplicado ($\gamma=0$), na equação (4.4)) é:

$$-\delta(r) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + V(r) \psi - \frac{2}{r} \psi = E \psi \quad (4.5)$$

A função de onda $\psi(r, \theta)$ é separável e pode ser escrita como

$$\psi(r, \theta) = R(r) e^{im\theta} \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.6)$$

Substituindo esta expressão na equação (4.5), as equações diferenciais, para a parte radial $R(r)$, que obtemos são

$$R'' + \frac{R'}{r} + \left(\frac{2}{r} + E - \frac{m^2}{r^2} \right) R = 0 \quad r \leq b \quad (4.7)$$

$$R'' + \frac{R'}{r} + \left(\frac{2}{r} - \frac{(V_0 - E)}{\delta} - \frac{m^2}{r^2} \right) R = 0 \quad r \geq b \quad (4.8)$$

onde R' e R'' denotam as derivadas de primeira e segunda ordem de $R(r)$ em função da variável r . Estudaremos as soluções dessas equações para as regiões de energias positivas e negativas. As energias E se tornam positivas quando o confinamento devido à barreira de potencial se torna mais importante que o potencial coulombiano, à medida que o raio do QD é reduzido.

No caso de $E < 0$, fazendo a transformação de coordenadas, $\xi = \frac{2}{\lambda} r$, na equação (4.7), obtemos

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial R}{\partial \xi} + \left\{ \frac{\lambda}{\xi} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\xi^2} \right\} R = 0 \quad , \quad (4.9)$$

onde o parâmetro λ está relacionado à energia E , pela relação $E = -(1/\lambda^2)$. Através da transformação $R(\xi) = \xi^{-1/2} \phi(\xi)$ podemos eliminar a derivada primeira da equação (4.9) e chegar à seguinte expressão, que deve ser satisfeita por ϕ ,

$$\phi''(\xi) + \left\{ \frac{\lambda}{\xi} - \frac{1}{4} - \frac{\frac{1}{4} - m^2}{\xi^2} \right\} \phi(\xi) = 0 \quad . \quad (4.10)$$

Essa é a equação de Whittaker [66] , cuja solução pode ser expressa como

$$\phi(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{m+1/2} M(|m| - \lambda + 1/2, 2|m| + 1; \xi) \quad (4.11)$$

onde $M(a, c; x)$ é a função hipergeométrica confluyente [66].

Na região fora do QD, $r > b$, para obtermos a função de onda do elétron precisamos resolver a equação (4.8). Como anteriormente, fazemos uma transformação de coordenadas, $\zeta = \frac{2r}{\lambda_1 \delta}$, de modo que podemos escrever,

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{\partial R}{\partial \zeta} + \left\{ \frac{\lambda_1}{\zeta} - \frac{\lambda_1^2 \delta}{4} (V_0 - E) - \frac{m^2}{\zeta^2} \right\} R = 0 \quad . \quad (4.12)$$

Aqui fazendo $E = V_0 - \frac{1}{\lambda_1^2 \delta}$, obtemos,

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{\partial R}{\partial \zeta} + \left\{ \frac{\lambda_1}{\zeta} - \frac{1}{4} - \frac{m^2}{\zeta^2} \right\} R = 0 \quad (4.13)$$

A equação acima tem a mesma forma que a equação (4.9), mas sua autofunção tem uma condição de contorno extra a satisfazer. Sua solução deve ir a zero quando r for para infinito, esta restrição não é satisfeita pela primeira solução da equação hipergeométrica $M(a, c; x)$, mas sim pela segunda solução $U(a, c; x)$ [66]. Então a

função de onda do nosso sistema é dada por:

$$\psi(r,\theta)=\begin{cases} A e^{-\xi/2} \xi^{|\mathbf{m}|} e^{im\theta} M(|\mathbf{m}|+\frac{1}{2}\lambda, 2|\mathbf{m}|+1; \xi) & r \leq b \\ B e^{-\zeta/2} \zeta^{|\mathbf{m}|} e^{im\theta} U(|\mathbf{m}|+\frac{1}{2}\lambda_1, 2|\mathbf{m}|+1; \zeta) & r \geq b \end{cases} \quad (4.14)$$

onde A e B são as constantes de normalização.

Os parâmetros ξ , ζ , λ e λ_1 são determinados de modo a satisfazerem as condições de continuidade da função de onda e conservação da corrente na interface do ponto quântico (QD). Desta forma para o estado fundamental $m=0$, a seguinte relação entre λ e λ_1 :

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{1}{\delta\lambda_1^2} - V_0 \quad (4.15)$$

e os parâmetros λ e λ_1 , são determinados da relação,

$$\frac{M'(1/2-\lambda, 1; 2b/\lambda)}{M(1/2-\lambda, 1; 2b/\lambda)} - \frac{\lambda}{\lambda_1} \frac{U'(1/2-\lambda_1, 1; 2b/\lambda_1\delta)}{U(1/2-1, 1; 2b/\lambda_1\delta)} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_1}\right) = 0 \quad (4.16)$$

onde $M'(x) = \frac{dM}{dx}$.

No caso de um QD com barreira de potencial de altura infinita, a função de onda do elétron no estado fundamental da impureza doadora é simplesmente dada por,

$$\psi(r,\theta) = A e^{-\xi/2} M(\frac{1}{2}\lambda, 1, \xi) \quad r < b \quad (4.17)$$

Para determinar o parâmetro λ , basta impormos a condição de contorno de anulação da função de onda na interface, ou seja,

$$\psi(r=b, \theta)=0 \quad (4.18)$$

o que nos leva a seguinte equação;

$$M\left(\frac{1}{2} - \lambda, 1; \frac{2}{\lambda}b\right) = 0 \quad (4.19)$$

para um QD com barreiras infinitas.

Para um determinado raio b , encontramos numericamente as raízes λ das equações transcendentais (4.16) e (4.19) e assim determinamos as energias do estado fundamental de um elétron ligado à impureza doadora, localizada no centro de um QD circular de GaAs-AlGaAs, respectivamente com alturas das barreiras de potencial finita e infinita na região de energias $E < 0$. A variação de tal energia em função do raio do QD está mostrado na figura 4.1, para dois potenciais de confinamento, $V_0=213.8$ meV (curva contínua), que corresponde à concentração de alumínio $x=0,3$ e $V_0=\infty$ (curva tracejada).

Como podemos observar da figura 4.1 para grandes valores do raio do QD, $b \geq 200$ angstroms, as energias da impureza nos dois casos tendem para o valor $E=-4 R_y^*$, que é o valor da energia do nível fundamental do átomo de hidrogênio 2D livre [69]. Notamos também que à medida que o raio diminui a energia do estado fundamental cresce e se aproxima de $E=0$, nos valores $b=53$ ($x=0,3$) e $b=72$ angstroms (barreira infinita). Para valores menores do raio, a energia se torna positiva e é esperado que no caso de barreiras infinitas quando $r \rightarrow 0$, $E \rightarrow \infty$.

A energia de ligação de uma impureza é definida como a diferença entre o valor da energia do estado fundamental do sistema sem a presença da impureza e com a presença da impureza. Sem a presença da impureza, no caso de barreira de potencial finita obtemos a energia do estado fundamental a partir da relação,

$$\frac{\gamma}{\beta} = \delta \frac{K_1(\beta b) J_0(\gamma b)}{J_1(\gamma b) K_0(\beta b)} \quad (4.20)$$

onde $\gamma^2=E$, $\beta^2=(V_0-E)$ e $J_n(x)$ e $K_n(x)$ são as funções de Bessel normal e modificada de primeira espécie. No caso de barreiras infinitas a equação que nos fornece as energias dos níveis de energia do elétron no QD é $J_0(\gamma b)=0$.

Figura 4.1—Energia do estado fundamental de uma impureza hidrogenóide localizada no centro de um QD circular de GaAs-AlGaAs, em função do raio da ponto para duas alturas das barreiras de potencial $V_0=\infty$ (linha tracejada) e $V_0=213.8 \text{ meV}$ ($x=0.3$) (linha contínua). Para grandes raios do QD a energia aproxima-se da energia para o átomo de hidrogênio 2D, $E=-4R_y^*$.

Na figura 4.2 mostramos a energia de ligação em função do raio do QD, para as mesmas barreiras de potenciais da figura 4.1. A energia de ligação no limite de raios muito grandes (limite 2D) deve ir para o valor $4R_y^*$ como esperado, e ela cresce com a diminuição do raio do QD, em toda a região de energias da impureza $E < 0$.

Figura 4.2— Energia de ligação do estado $1s$ ($m=0$) em função do raio do ponto quântico (QD), para barreiras de potencial finita ($V_0=36,67 R_y^*, x=0,3$) (linha contínua) e infinita (linha tracejada).

Quanto menor o raio do fio maior é a diferença entre as energias de ligação dos QD com barreiras finitas e infinitas. Naturalmente será na região de pequenos raios ($E > 0$) não mostrada na figura que as diferenças serão maiores, para o caso com barreiras infinitas ($V_0 = \infty$), quando $b \rightarrow 0$ a energia de ligação deve ir ao infinito.

Já para o caso de barreiras finitas, espera-se que diminuindo o raio do QD a energia cresça até um certo valor máximo e a partir deste valor diminua tendendo para o valor da energia do estado fundamental de um átomo de hidrogênio 2D no AlGaAs, quando $b \rightarrow 0$. Este comportamento é observado para poços quânticos quase-bidimensionais (Q2D) [67] e fios quânticos quase-unidimensionais (Q1D) [68]. Ressalte-se que as energias de ligação aqui obtidas para o QD quase-zero-dimensional são maiores que aquelas para os sistemas 2D e Q1D.

As soluções das equações (4.7) e (4.8) na região de energias positivas, $E > 0$, são obtidas a partir daquelas para o caso $E < 0$, substituindo-se λ por $i\eta$ e ξ por $-i\xi$ na solução $r < b$, dentro do QD. A solução para a região $r > b$ permanece a mesma, ou seja, a função de onda será dada pela expressão,

$$\psi(r, \theta) = \begin{cases} A e^{-i\xi/2} \xi^{|m|} e^{im\theta} M(|m| + \frac{1}{2} - i\eta, 2|m| + 1; -i\xi) & r \leq b \\ B e^{-\zeta/2} \zeta^{|m|} e^{im\theta} U(|m| + \frac{1}{2} - \lambda_1, 2|m| + 1; \zeta) & r \geq b \end{cases} \quad (4.21)$$

então $E = 1/\eta^2$, com $\eta < 0$. No caso de barreiras infinitas encontramos E resolvendo a equação transcendental,

$$M(|m| + \frac{1}{2} - i\eta, 2|m| + 1; -\frac{2ib}{\eta}) = 0 \quad (4.22)$$

Para pontos quânticos (QD) com barreiras de potenciais finitas a equação que determina os parâmetros η e λ_1 têm a mesma forma que aquela para o caso anterior

$E < 0$ e é obtida a partir da equação (4.16) fazendo-se as substituições, $\lambda \rightarrow i\eta$ e $\xi \rightarrow -i\xi$.

Neste caso então a equação será,

$$\frac{M'(1/2-i\eta, 1; -2ib/\eta)}{M(1/2-i\eta, 1; -2ib/\eta)} - \frac{i\eta}{\lambda_1} \frac{U'(1/2-\lambda_1, 1; 2b/\lambda_1\delta)}{U(1/2-\lambda_1, 1; 2b/\lambda_1\delta)} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\eta}{\lambda_1}\right) = 0 \quad (4.23)$$

Embora as formas das equações nas regiões $E < 0$ e $E > 0$ sejam muito parecidas, as soluções das equações (4.21) e (4.22) são bem mais complicadas, devido aos argumentos complexos. Na verdade não conseguimos encontrar as raízes dessas equações devido a problemas numéricos e sendo assim devemos usar um outro método para encontrarmos as energias nessa região onde $E > 0$. Na próxima seção obteremos estes resultados através do método variacional.

Antes porém vale a pena observarmos que se nas equações para o caso do QD circular, trocarmos $|m| + \frac{1}{2}$ por $|L| + 1$, onde L é um inteiro, nós obtemos as equações para o caso da impureza no centro de um QD esférico. Por exemplo no caso de barreiras infinitas, das equações (4.19) e (4.21) obtemos para o caso esférico,

$$M(|L|+1-\lambda, 2|L|+2; \frac{2}{\lambda}b) = 0 \quad E < 0 \quad (4.24)$$

$$M(|L|+1-i\eta, 2|L|+2; -\frac{2ib}{\eta}) = 0 \quad E > 0 \quad (4.25)$$

Para esse problema as soluções para as energias na região de energias positivas, são facilmente obtidas, pois as autofunções são funções de Coulomb e estas possuem expansões em série $\phi_L(\eta, b)$ [66], que simplificam o tratamento com as funções complexas.

4.2.2 Solução com campo magnético aplicado. Método variacional.

A solução da equação de Schrödinger com a hamiltoniana H dada na equação (2.4) com $\gamma \neq 0$, não pode ser resolvida exatamente. Então para calcularmos as energias do estado fundamental ($m=0$) e dos estados excitados, usaremos o método variacional escolhendo nossa função de onda tentativa da forma,

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} \phi_m(r) \quad (4.26)$$

onde

$$\phi_m(r) = \begin{cases} A_1 r^{|m|} e^{-\frac{\beta r^2}{2}} e^{-\frac{\alpha r}{2}} & r \leq b \\ A_2 r^{\frac{|m|}{\delta}} e^{-\frac{\beta r^2}{2\delta}} e^{-\frac{\alpha r}{2\delta}} & r \geq b \end{cases} \quad (4.27)$$

com α e β os parâmetros variacionais, $\delta = m_1/m_2$ e A_1 e A_2 são as constantes de normalização. Como vemos nossa função de onda é um produto de uma função gaussiana por uma função hidrogenóide. Impondo as condições de contorno na interface do ponto quântico (QD) podemos determinar a relação entre as constantes A_1 e A_2 e da condição de normalização determinamos que,

$$A_1 = (Y_1 + e^{-\beta b^2 \mu} e^{-\alpha b \mu} b^{2|m| \mu} Y_2)^{-1/2} \quad (4.28)$$

onde

$$\mu = 1 - 1/\delta \quad (4.29)$$

$$Y_1 = \int_0^b r^{2|m|+1} e^{-\beta r^2} e^{-\alpha r} dr \quad (4.30)$$

$$Y_2 = \int_b^\infty r^{\frac{2|m|}{\delta}+1} e^{-\frac{\beta r^2}{\delta}} e^{-\frac{\alpha r}{\delta}} dr \quad (4.31)$$

e

$$A_2 = A_1 e^{-\frac{\beta b^2}{2}\mu} e^{-\frac{\alpha b}{2}\mu} b^{|m|\mu} \quad (4.32)$$

A energia do nível m da impureza doadora será obtida minimizando-se o valor médio da Hamiltoniana H , entre os autoestados Ψ , em função dos parâmetros variacionais α e β . A expressão matemática para a energia será então:

$$E_m = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int_0^b A_1^2 e^{-\beta r^2} e^{-\alpha r} r^{2|m|} F_1(r) dr \\ + \delta \int_b^\infty A_2^2 e^{-\frac{\beta r^2}{\delta}} e^{-\frac{\alpha r}{\delta}} r^{\frac{2|m|}{\delta}} F_2(r) dr \quad (4.33)$$

onde

$$F_1(r) = -r \left\{ -\frac{|m|}{r^2} \beta + \left(\frac{|m|}{r} - \beta r - \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\} - \left\{ \frac{|m|}{r} - \beta r - \frac{\alpha}{2} \right\} - 2 + \left\{ \frac{m^2}{r} + m \gamma r \right\} + \frac{\gamma^2}{4} r^3 \quad (4.34)$$

e

$$F_2(r) = -r \left\{ -\frac{|m|}{\delta r^2} \frac{\beta}{\delta} + \frac{1}{\delta^2} \left(\frac{|m|}{r} - \beta r - \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\} - \frac{1}{\delta} \left\{ \frac{|m|}{r} - \beta r - \frac{\alpha}{2} \right\} - 2 + \frac{1}{\delta} \left\{ \frac{m^2}{r} + m \gamma r \right\} + \frac{\gamma^2}{4} r^3. \quad (4.35)$$

Para calcularmos a energia de ligação, precisaremos também calcular as energias para um elétron confinado em um QD sem a presença da impureza. Nesse caso a função de onda tentativa que escolhemos é a seguinte:

$$\psi_o(r, \theta) = \begin{cases} \frac{B}{\sqrt{2\pi}} J_m(\nu r) e^{im\theta} e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} & r \leq b \\ \frac{A}{\sqrt{2\pi}} K_m(\kappa r) e^{im\theta} e^{-\frac{\alpha r^2}{2\delta}} & r \geq b \end{cases}, \quad (4.36)$$

onde $J_m(x)$ e $K_m(x)$ são as funções de Bessel, α e κ são os parâmetros variacionais, e v é obtido da expressão abaixo que vem das condições de contorno em $r=b$.

$$\frac{v}{\kappa} = \delta \frac{K_m'(\kappa b) J_m(vb)}{J_m'(vb) K_m(\kappa b)} \quad (4.37)$$

onde $K'(x)$ denota a derivada de primeira ordem da função de Bessel.

Ainda as constantes de normalização A e B são dadas por:

$$B = A \frac{K_m(\kappa b)}{J_m(vb)} e^{-\frac{\alpha b^2}{2\delta}} e^{-\frac{\alpha b^2}{2}}, \quad (4.38)$$

e

$$A^{-2} = \left\{ \frac{K_m^2(\kappa b)}{J_m^2(vb)} e^{-\alpha b^2(\frac{1}{\delta}-1)} \int_0^b r dr J_m^2(vb) e^{-\alpha r^2} + \int_b^\infty r dr K_m^2(\kappa r) e^{-\frac{\alpha}{\delta} r^2} \right\} \quad (4.39)$$

Os níveis de energia do elétron no QD serão então obtidos minimizando-se o valor médio da Hamiltoniana H_{simp} , que é a hamiltoniana H sem a interação coulombiana, em função dos parâmetros α e κ , portanto,

$$\epsilon_m = \langle \psi_0 | H_{\text{simp}} | \psi_0 \rangle \quad (4.40)$$

Para campo magnético nulo, $\gamma=0$, o resultado variacional para a energia do estado fundamental $m=0$, coincide com o resultado exato dado pela equação (4.20).

Os resultados do cálculo variacional para campo magnético nulo ($\gamma=0$), para as energias do estado fundamental do sistema com a presença da impureza (linha tracejada) e sem a presença da impureza (linha contínua), em função do raio, para um QD com altura das barreiras de potencial, $V_0=213,8$ meV ($36,67 R_y^*$; $x=0,3$), são mostrados na figura 4.3.

Figura 4.3- Variação com o raio do QD das energia do estado fundamental do sistema com a presença da impureza (curva tracejada) e na ausência da impureza (curva contínua), para campo magnético nulo ($\gamma=0$), calculadas através do método variacional. A separação entre as curvas nos fornece a energia de ligação.

A diferença entre essas duas energias nos fornece a energia de ligação da impureza. Como vemos à medida que $r \rightarrow 0$, a energia de ligação tende para $5.48 R_y^*$, a energia do estado fundamental de um átomo de hidrogênio 2D no AlGaAs. A concordância entre os resultados para a energia da impureza E_0 (barreira finita) obtidas através do cálculo variacional e aqueles mostrados na figura 4.1 (solução

analítica) na região onde $E_0 < 0$, são excelentes, quase coincidentes. Esse fato pode ser melhor visto na figura 4.4 onde comparamos as energias de ligação obtidas pelo método variacional para $\gamma=0$ (linha contínua) com aquelas obtidas na seção anterior (linha tracejada) para concentração de alumínio $x=0,3$ e representadas na figura 4.2. As curvas praticamente se sobrepõem, o que no mínimo significa que nossa função de onda tentativa é muito boa.

Figura 4.4— Comparação entre as energias de ligação obtidas pelo cálculo variacional (linha contínua) e através da solução exata da seção anterior (linha tracejada) em função do raio para um QD com barreira de potencial finita ($x=0,3$), para campo magnético nulo ($\gamma=0$). A concordância é excelente.

Na figura 4.5 mostramos para um QD de GaAs-Al_{0,3}Ga_{0,7}As para três valores do campo magnético aplicado $\gamma=0.1$ e 2, a energia de ligação da impureza em função do raio do QD. Como podemos notar a curva tem o comportamento esperado e já antecipado, à medida que o raio diminui a energia de ligação atinge um máximo e depois decresce tendendo para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio 2D no AlGaAs, quando o raio for para zero. O efeito do campo magnético de aumentar as energias de ligação, só começa a ser sentido pelo elétron a partir de $r \geq 100$ angstroms, antes desse valor sua influência é muito pequena. Isto ocorre porque o potencial de confinamento é muito forte.

Também a energia de ligação em função da concentração de alumínio na liga de AlGaAs para um ponto quântico com raio de 100 angstroms é mostrado na figura 4.6. A influência do campo magnético na energia de ligação é tanto maior quanto menor for a altura da barreira de potencial.

Concluindo calculamos a energia de ligação de um impureza doadora hidrogenóide localizada no centro de um ponto quântico circular de GaAs-AlGaAs, em função do raio do QD para várias alturas das barreiras de potencial e vários valores do campo magnético aplicado. Sem a presença do campo magnético obtivemos a solução analítica do problema, através da equação de Schrödinger. Com campo aplicado utilizamos o método variacional. No caso de campo nulo as duas soluções concordam muito bem. A influência do campo magnético na energia de ligação só é sentida para QD com raios maiores que 100 angstroms. Para raios menores o forte potencial de confinamento é dominante e o campo magnético não tem influência.

Figura 4.5—Energia de ligação de uma impureza hidrogenóide localizada no centro de um ponto quântico (QD) circular com barreira de potencial finita, concentração de alumínio $x=0,3$, para três valores do campo magnético aplicado. $\gamma=0,1$ e 2 ($B(T)=6.65 \gamma$).

Figura 4.6— Variação da energia de ligação em função da concentração x de alumínio na liga de AlGaAs, para vários valores do parâmetro γ , $\gamma=0,1$ e 2 , para um ponto quântico com raio de 100 angstroms.

Referências

- 1— L. Esaki e R. Tsu, IBM Res. Note, RC-2418 (1969)
- 2— T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern, Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982)
- 3— R. C. Miller, A. C. Gossard, D.A. Kleinman e O. Munteanu, Phys. Rev. B 29, 3740 (1975)
- 4— G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 4714 (1981)
- 5— K. von Klitzing, G. Dorda and M. Peper, Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980)
- 6— D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett 48, 1559 (1982)
- 7— P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan e W. W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett 41, 635 (1982)
- 8— Ch.Sikorski e U.Merkt, Phys. Rev. Lett. 62, 2164(1989)
- 9— F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B 37, 1402 (1988-II)
- 10— H. Sakaki, Jpn. J. Appl. Phys. 19, L735 (1980)
- 11— Veja por exemplo os proceedings das Conferências Internacionais sobre Propriedades Eletrônicas de Sistemas Bi-dimensionais, Surf. Sci. 142 (1984); idem 140 (1986) e idem 196 (1988).
- 12— D. M. Larsen, Phys. Rev. B 30, 4595 (1984)
- 13— R. Lasnig, Phys. Rev B 30, 7132 (1984)
- 14— S. Das Sarma e B. A. Mason, Ann. Phys (N.Y) 163, 78 (1985)
- 15— W. Xiaoguang, F. M. Peeters e J. T. Devrese, Phys. Rev. B 31, 3420 (1985)
- 16— F. M. Peeters e J. T. Devrese, Phys. Rev. B 31, 3689 (1985)
- 17— M. H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B 35, 7717 (1987) ; Surf. Sci. 196, 459 (1988); Solid Stat. Comm. 65, 1185 (1988); Superll. Microst. 5, 141 (1989)
- 18— F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B 38, 8477 (1988)
- 19— F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, *Current Topics on Semiconductor Physics*, edited by O. Hipólito, G. E. Marques e A. Fazzio (World Scientific) página 7 (1988)

- 20— F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, *Superlatt. Microstruct.* 6, 107 (1989)
- 21— M. Horst, U. Mercket, W. Zawadzki, J. C. Maan, and K. Ploog, *Solid State Commun.* 53, 403 (1985).
- 22— H. Sigg, P. Wyder, and J. A. A. J. Perenboom. *Phys. Rev. B* 31, 5253 (1985).
- 23— M. A. Hopkins, R. J. Nicholas, M. A. Brummell, J. J. Harris, and C. T. Foxon, *Superlatt. Microstruct.* 2, 319 (1986).
- 24— J. Singleton, R. J. Nicholas, D. C. Rogers, e C. T. Foxon, *Surf. Sci.* 196, 429 (1988).
- 25— S. Huant, W. Knap, G. Martinez, and B. Etienne, *Europhys. Lett.* 7(2), 159 (1988).
- 26— Y. H. Chang, B. D. Mc Combe, J. M. Mercy, A. A. Reeder, J. Ralston and G. A. Wicks, *Phys. Rev. Lett.* 61, 1408 (1988).
- 27— S. Huant e G. Martinez, *Phys. Rev. Lett.* 62, 16, 1924 (1989).
- 28— F. A.P.Osório, M. Z. Maialle, e O. Hipolito, Internal Report, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy, November (1989).
- 29— F. A. P. Osório, M. Z. Maialle, e O. Hipólito, 20th. International Conference on the Physics of Semiconductor, Eds. E. M. Anastasakes and J. D. Joannopoulos, World Scientific, Singapore, 1017 (1990).
- 30— F. A. P. Osório, M. Z. Maialle, e O. Hipólito, *Solid State Comm.* 81, 8, 567 (1991).
- 31— S. R. Cohn, D. M. Larsen and B. Lax, *Phys. Rev. B* 6, 1367 (1972).
- 32— R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* 31, 913 (1985)
- 33— G. Lindemann, R. Lasnig, W. Seidenbusch e E. Gornick, *Phys. Rev. B* 28, 4693 (1983)
- 34— P. Pfeffer, W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* 37, 2695 (1988)
- 35— *Principals of Solid State Physics*, J. M. Ziman, Cambridge University Press, cap. 5
- 36— S. Huant, comunicação privativa (private communication).

- 37— J. M. Shi, F. M. Peeters, G. Q. Hai e J. T. Devreese. *Phys. Rev. B* 44, 5692 (1991)
- 38— S. Huant, S. P. Nadja, W. Knap, G. Martinez, B. Etienne, C. J. G. M. Langerak, J. Singleton, R. A. J. Thomeer, G. Hai, F. M. Peeters e J. T. Devreese, em 20th International Conference on the Physics of Semiconductors, Eds. E. M. Anastasakes and J. D. Joanopoulos, World Scientific, Singapore, 1369 (1990); e J. Singleton e Langerak em comunicação privativa.
- 39— E. D. Palik, G. S. Picus, S. Teitler and R. F. Wallis. *Phys. Rev.* 122, 475 (1961).
- 40— J. Waldeman, D. M. Larsen, P. E. Tannenwald, C. C. Bradley, B. Lax e D. R. Cohn. *Phys. Rev. Lett.* 23, 1033 (1969)
- 41— K. Kash, *J. Lumin.* 46, 69 (1990)
- 42— S. E. Laux, D. J. Franck e F. Stern, *Surf. Sci.* 196, 101 (1988)
- 43— J. P. Leburton, *J. Appl. Phys.* 56, 2850 (1984)
- 44— M. H. Degani e O. Hipólito, *Solid State Commun.* 65, 1185 (1988)
- 45— M. H. Degani e O. Hipólito, *Superll. and Micstruct* 5, 137 (1989)
- 46— M. H. Degani e O. Hipólito, *Phys. Rev. B* 40, 11937 (1989)
- 47— M. H. Degani e Gil A. Farias, *Phys. Rev. B* 42, 11950 (1990)
- 48— L. Wendler, A. V. Chaplick, O. Hipólito, R. Haupt e F. A. P. Osório, aceito para publicação no *Phys. Rev. B* (1992)
- 49— F. A. P. Osório, Dissertação de Mestrado, Orientação M. H. Degani, IFQSC, USP (1988)
- 50— L. Wendler, *Phys. Status Solidi B* 141, 129 (1985)
- 51— N. Mori e T. Ando, *Phys. Rev. B* 40, 6175 (1989)
- 52— M. H. Degani e O. Hipólito, *Phys. Rev. B* 41, 3572 (1987)
- 53— M. H. Degani e O. Hipólito, *Surf. Sci.* 196, 459 (1988)
- 54— Guo-qiang Hai, F. M. Peeters e J. T. Devreese. *Phys. Rev. B* 42 (1990)
- 55— K. Sood, J. Menendez, M. Cardona e K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* 54, 2111 (1985); 54, 2115 (1985)
- 56— P. Lambin, J. P. Vigneron, A. A. Lucas, P. A. Thiry, M. Liehr, J. J. Pireaux, R.

- Caudano e T. J. Kuech, Phys. Rev. Lett. 56, 1842 (1986)
- 57— Shi-Wei Gu, Xiao-Jun Kong e Cheng-Wen Wei, Phys. Rev. B 36, 7984 (1987)
- 58— Cheng-Wen Wei, Xiao-Jun Kong, Shi-Wei Gu, Phys. Rev. B 38, 8390 (1988)
- 59— Xiao-Jun Kong, Cheng-Wen Wei e Shi-Wei Gu, Phys. Rev. B 39, 3230 (1989-I)
- 60— K. Kash, A. Scherer, J. M. Worlock, H. G. Craighead e M. C. Tamargo, Appl. Phys. Lett. 49, 1043 (1986)
- 61— F. M. Peeters, Phys. Rev. B 42, 1486 (1990)
- 62— Q. P. Li, K. Knai, S. K. Yip, S. Das Sarma and H. D. Drew, Phys. Rev. B 43, 5151 (1991-II).
- 63— W. Que, Solid Stat Comm., 81, 9, 721, (1992).
- 64— F. Greerinckx, F. M. Peeters e J. T. Devrese, J. Appl. Phys. 68 (7), 3435 (1990).
- 65— C. M. Hsiao, W. N. Mei e D. S. Chuu, Solid State Comm. 81, 10, 807 (1992)
- 66— M. Abramowics e S. Stegun, Handbook of Mathematical Functions
- 67— C. Mailhot, Yia-Chung e T. C. McGill, Phys. Rev. B 26, 4449 (1982)
- 68— F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, Superll. Microst. 6, 111 (1989)
- 69— B. Zaslów e M. E. Zender, Amer. Journ. of Phys. 1118 (1967)