UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

ESTADOS DE IMPUREZA EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$.

Marcelo Zoéga Maiallé

Dissertação apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos para obtensão do Título de Mestre em Física Básica.

Orientador : Prof.Dr. Oscar Hipólito.

SÃO CARLOS

USP / IFQSC / SBI
8-2-000814

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

Marcelo Zoega Maialle

APRESENTADA

AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 02 DE junho DE 1989.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr.Oscar Hipólito Orientador

Dr.Eliermes Arraes Meneses

Dr.José Roberto Leite

Aos meus pais.

Agradecimentos

Ao professor Oscar Hipólito por me orientar de maneira segura e atencisosa sempre que se fez necessário.

Ao professor Marcos Henrique Degani pelas úteis discussões e sugestões que em muito contribuiram na realização deste trabalho.

Aos colegas, funcionários e professores do Instituto de Física e Química de São Carlos que direta ou indiretamente me auxiliaram.

Ao centro de computação, à biblioteca e ao setor gráfico deste Instituto pela oportunidade de fazer uso de seus recursos.

À FAPESP pelo suporte financeiro.

Lista de figuras.

Figura 1 - Fatores de forma F_{1111}, F_{2211}, F_{2222} em função de $\underline{q}$, como definido em (37), para um poço de L = 100 Å , x = 0,3.

Figura 2 - Polarização Π_{11} (eq.(26)) em função de q para o mesmo poço da figura 1., com Ns = $10^{10}cm^{-2}$.

Figura 3 - Enegia de ligação do estado tipo 1s da primeira subbanda em função da densidade eletrônica (L = 100 Å , x = 0,3).

Figura 4 - Energia de ligação do estado tipo 2p± da primeira subbanda em função da densidade eletrônica (L = 100 Å , x = 0,3).

Figura 5 - Idem da figura 3, só que agora a segunda subbanda participa do efeito de blindagem eletrônica.

Figura 6 - Energia de ligação do estado tipo 1s da segunda subbanda (linha cheia) em função da densidade eletrônica (L = 100 Å , x = 0,3). A linha em tracejado leva em consideração o efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs.

Figura 7 - Idem da figura 6, mas agora para o estado tipo 2p±.

figura 8 - Energia de ligação à Ns = 0 em função da largura L do poço para estados do tipo 1s (8a) e estados do tipo 2p± (8b), tanto da primeira quanto da segunda subbanda. As curvas superiores para uma dada subbanda são obtidas com x = 0,3 e as inferiores com x = 0,1.

Figura 9 - Energias de ligação para estado do tipo 1s da primeira subbanda como função da densidade eletrônica. Mostramos, juntas aqui, as energias para um poço de x = 0,3 , L = 100 Å e L = 200 Å.

Figura 10 - Energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda (L = 200 Å , x = 0,3) como função da posição da impureza z_0 no poço, onde z_0= 0 indica a impureza no centro do poço. Mostramos este resultado para três densidades Ns (10^7, 10^{11}, $10^{13}cm^{-2}$). A curva em tracejado mostra o resultado à Ns = 10^7cm^{-2} abaixando o valor de x para 0,1.

Figura 11 - Energia de ligação do estado 2p± da primeira subbanda (L = 200 Å, x = 0,3) para três valores da densidade Ns (10^3, 10^5, 10^7cm^{-2}).

Figura 12 - Energia de ligação do estado 1s da segunda subbanda (L = 200 Å , x = 0,3) como função da posição da impureza z_0 no poço. Mostramos este resultado para três densidades Ns (10^7, 10^{11}, $10^{13}cm^{-2}$)., sendo a curva em tracejado obtida para um poço

de mesma largura mas com x = 0,1 à Ns = $10^7 cm^{-2}$.

Figura 13 - Energia de ligação do estado 2p± da segunda subbanda (L = 200 Å, x = 0,3) para três valores de Ns. A curva em tracejado diz respeito a este mesmo tipo de estado, mas pertencente à primeira subbanda.

Figura 14 - Diferenças das energias de ligação dos estados do tipo 1s da primeira e segunda subbanda ($E_1^{1S}-E_2^{1S}$) em funcão da posição da impureza no mesmo poço da figura anterior.

Figura 15 - Energias de ligação para os estados 1s da primeira e segunda subbanda , bem como a diferença entre elas, em função da posição da impureza no poço (L = 205 Å, x = 0,25, Ns = $1,5.10^{11} cm^{-2}$).

Figura 16 - Densidades de estados obtidas das curvas mostradas na figura 10.

Figura 17 - Densidade de estados para a interpretação de transições 1s-2p±. Estes resultados forem obtidos da subtração das curvas das figuras 10 e 11 para Ns = $10^7 cm^{-2}$.

Figura 18 - Densidades de estados obtida das curvas mostradas na figura 14.

Figura 19 - Energias de transição intra-subbanda 1s-2p+ como função do campo magnético à uma densidade eletrônica nula (L = 210Å, x = 0,3) para z_o=0 e L/2 (na parede do poço). Também mostramos os resultados teóricos de Greene e Bajaj[10] (GB) e os dados experimentais de Mercy et al.[14] para este mesmo poço.

Figura 20 - Efeito da blindagem eletrônica nas energias de ligação dos estados 1s e 2p± na presença de campo magnético (B = 12 T) em um poço de L = 200Å e x = 0,3. A linha em tracejado indica o primeiro nível de Landau (n = 0).

Figura 21 - Energia de transição 1s-2p+ como função do campo para Ns = 0, 10^{10}, $10^{11}cm^{-2}$ (L = 200Å, x = 0,3, z_o= 0).

Figura 22 - Energia de transição 1s-2p+ obtida dos resultados mostrados na figura 20.

RESUMO

Com o objetivo de contribuir para o entendimento de recentes resultados experimentais relativos à transições óticas entre estados eletrônicos localizados, observados em estruturas de múltiplos poços quânticos, realizamos um estudo teórico investigando os níveis de energias de um elétron ligado a uma impureza hidrogenóide num poço quântico simples.

Utilizando a equação de massa efetiva calculamos através do método variacional as energias de um elétron ligado a uma impureza doadora em um poço quântico de barreiras de potencial finitas. Neste cálculo a blindagem eletrônica do potencial da impureza é tratada no formalismo RPA, podendo tanto o elétron ligado quanto os elétrons livres ocuparem as duas primeiras subbandas do sistema.

Apresentamos nossos resultados para poços quânticos de GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ variando a densidade eletrônica e a posição da impureza. Também a densidade de estados de impureza é calculada, uma vez que não restringimos a posição da impureza no poço.

O efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs e a presença do campo magnético são levados em conta para melhor interpretação dos dados experimentais, que em geral estão em boa concordância com nossos resultados.

ABSTRACT

The mass-effective equation is used in order to calculate the intra and inter-subband transition energies in the Quantum Well structures.

The electronic screening of the shallow donor impurity is inclued in the RPA method and the energies are found through variational formalism. The binding energies are calculated as function of the electronic density and impurity position inside the well.

We have calculated the density of states due to impurity position and also the non-parabolicity effect of the GaAs conduction band is analised. For better fitting between our results and the experimental data, we have inclued the magnetic field in the system.

Our results seem in a good agreement to those experimentally obtained.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.....1

CAPÍTULO 1 - DESENVOLVIMENTO TEÓRICO.....9

1.a - POÇO QUÂNTICO SEM IMPUREZA.....9

1.b - POÇO QUÂNTICO COM IMPUREZA RASA DOADORA.....14

1.c - BLINDAGEM ELETRÔNICA DO POTENCIAL DA IMPUREZA NA APROXIMAÇÃO DAS FASES ALEATÓRIAS (RPA).....18

1.d - TRATAMENTO DA CONTRIBUIÇÃO DA NÃO-PARABOLICIDADE DA BANDA DE CONDUÇÃO DO GaAs PARA A ENERGIA DE LIGAÇÃO.....24

CAPÍTULO 2 - ENERGIA DE LIGAÇÃO COM A IMPUREZA NO CENTRO DO POÇO.....27

2.a - DENSIDADE ELETRÔNICA OCUPANDO APENAS A PRIMEIRA SUBBANDA.....27

2.b - OCUPAÇÃO DA SEGUNDA SUBBANDA.....34

2.c - EFEITO DA NÃO-PARABOLICIDADE DA BANDA DE CONDUÇÃO DO GaAs NAS ENERGIAS DE LIGAÇÃO.....40

2.d - DEPENDÊNCIA DA ENERGIA DE LIGAÇÃO COM A LARGURA DO POÇO.....42

CAPÍTULO 3 - DEPENDÊNCIA DA ENERGIA DE LIGAÇÃO COM A POSIÇÃO DA IMPUREZA DENTRO DO POÇO QUÂNTICO.....46

3.a - ENERGIA DOS ESTADOS LIGADOS DA PRIMEIRA SUBBANDA EM FUNÇÃO DA POSIÇÃO DA IMPUREZA 46

3.b - ENERGIA DE LIGAÇÃO DOS ESTADOS DA SEGUNDA SUBBANDA EM FUNÇÃO DA POSIÇÃO DA IMPUREZA.....50

3.c - COMPARAÇÃO ENTRE NOSSOS RESULTADOS E AQUELES OBTIDOS EXPERIMENTALMENTE EM MEDIDAS DE TRANSIÇÕES INTER-SUBBANDAS.....54

3.d - DENSIDADE DE ESTADOS DE IMPUREZA.....61

CAPÍTULO 4 - IMPUREZA RASA DOADORA EM UM POÇO QUÂNTICO NA PRESENÇA DO CAMPO MAGNÊTICO.....67

4.a - DESENVOLVIMENTO TEÓRICO.....67

4.b - DEPENDÊNCIA DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO ENTRE ESTADOS LIGADOS 1S-2P+ DA PRIMEIRA SUBBANDA COM O CAMPO MAGNÉTICO.....70

4.c - DEPENDÊNCIA DA ENERGIA DE TRANSIÇÃO 1S-2P+ COM A DENSIDADE ELETRÔNICA NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO.....74

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES.....84

REFERÊCIAS.....88

INTRODUÇÃO

Em anos recentes vem se observando um grande interesse no estudo de estruturas semicondutoras bidimensionais devido tanto a sua importância tecnológica, no avanço da microeletrônica, quanto acadêmica, no entendimento da Física fundamental de baixa dimensionalidade. Dentre todas estas estruturas nos interessa particularmente o poço quântico (Quantum Well) e, dentre todas as suas características relevantes ao estudo, estamos apenas interessados nas propriedades de elétrons localizados devido à presença de impurezas doadoras neste sistema.

Em 1970 Ezaki e Tsu[1] propuseram uma nova hetero-estrutura semicondutora com certa periodicidade unidimensional, as Super-Redes. Pelo crescimento cuidadosamente controlado de hetero-estruturas alternando-se camadas de diferentes semicondutores consegue-se o que se conhece como " múltiplos poços quânticos " (MQW) e " super-redes " (SL). Tais estruturas se mostram interessantes pois obtem-se dispositivos com as mais variadas propriedades apenas modificando suas arquiteturas durante o processo de crescimento cristalilo.

Podemos descrever simplificadamente uma estrutura MQW por um potencial unidimensional retangular para os elétrons na banda de condução e para os buracos na banda de valência. Como exemplo, podemos citar uma estrutura MQW feita de GaAs e $Ga_{1-x}Al_xAs$, onde **x** corresponde à concentração de alumínio que está

diretamente relacionada com a altura das barreiras do potencial. Se as camadas destes dois semicondutores são finas o bastante ($\approx$ 200 Å), efeitos quânticos de confinamento dos elétrons e buracos nestes poços tornam-se importantes, criando níveis discretos de energias (subbandas) pela quantização do movimento dos portadores na direção do crescimento da amostra. Para estruturas SL o confinamento não é tão acentuado, havendo a possibilidade de tunelamento dos portadores de um poço para o outro, dando origem à bandas de energias permitidas; fato este decorrente dos baixos valores da largura da barreira de potencial e/ou da altura da mesma nestas estruturas.

Estudos teóricos têm levado mais adiante a idéia inicial de Esaki e Tsu uma vez que técnicas de crescimento de hetero-estruturas vêm sendo desenvolvidas com muito sucesso. Mais recentemente sistemas quase-unidimensionais, como os fios quânticos, tem sido objeto de investigação tanto teórica quanto experimental[2]. Entre as técnicas de crescimento que mais se destacam podemos citar a MOCVD e a MBE. Com destaque para esta última (Molecular Beam Epitaxy), estruturas de GaAs-GaAlAs vem sendo crescidas com alta qualidade, obtendo-se precisão de camadas atômicas. Isto se deve em parte ao controle das baixas taxas de crescimento e ao monitoramento (por feixe eletrônico, por exemplo) da amostra durante seu processo de crescimento. Assim sendo, tem-se conseguido estruturas com interfaces abruptas e larguras de poços e barreiras cada vez mais próximos dos valores

inicialmente objetivados. Referimo-nos às hetero-estruturas de GaAs-GaAlAs por apresentarem um casamento de parâmetros de rede entre estes dois materiais quase perfeito ($\Delta a/a \simeq 0.06\%$ para baixas concentrações de alumínio, sendo $a = 5$ Å o parâmetro de rede do GaAs), o que previne efeitos indesejáveis de tensões nas interfaces.

No que diz respeito aos estudos teóricos para poços quânticos dopados com impurezas rasas, o trabalho de Bastard[3] dá o primeiro passo para o entendimento de estados eletrônicos ligados a estas impurezas. Neste trabalho os poços quânticos são considerados completamente independentes, sendo toda a atenção voltada para um poço simples de barreiras de potencial infinitas. O método variacional, já comprovadamente bem sucedido nas estruturas MOS, foi usado neste cálculo das energias de ligação do estado fundamental do sistema. Com este estudo observou-se comportamentos básicos da energia do elétron ligado a uma impureza rasa em poços quânticos, entre os quais podemos destacar a maior energia de ligação para impurezas no poço comparadas àquelas no "bulk" do material, o aumento desta energia com o estreitamento do poço e sua diminuição quando a impureza é deslocada do centro para perto da interface. Este último comportamento é responsável por uma banda de energia que introduz o conceito de densidade de estados associada à posição da impureza no poço.

Logo após, independentementes, Greene e Bajaj[4] e Mailhiot et al.[5] (1982/83) reproduziram os resultados do Bastard

para um poço quântico de barreiras de potencial finitas, e ainda calcularam as energias de ligação para estados hidrogenóides excitados. Com a introdução da barreira finita observou-se um efeito novo que consiste na diminuição da energia de ligação com o estreitamento do poço quando sua largura for extremamente fina ($L < 10Å$); o que foi logo atribuido ao "vazamento" da função de onda do elétron ligado através das barreiras finitas do potencial.

Trabalhos posteriores[6,7], seguindo basicamente a mesma linha dos anteriores já citados, trataram de introduzir a contribuição da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs no cálculo da energia de ligação. Foi observado que tal contribuição aumentava esta energia à medida que o elétron se localizava em um nível energético cada vez mais elevado em relação à base da banda de condução, ou seja, este aumento era mais evidente em poços estreitos e em estados ligados pertencentes à subbandas excitadas. Também a influência da diferença de massas efetivas do GaAs e do GaAlAs na energia de ligação foi investigada[8,9] e concluiu-se que ela não é tão relevante se o poço não for por demais estreito ($L < 50$ Å).

Tendo em vista os dados experimentais para transições intra- subbandas ($1s \rightarrow 2p$, $m = \pm 1$) que são obtidas na presença de campo magnético, Greene e Bajaj[10] analisaram teoricamente o efeito deste campo nas energias dos estados ligados ressonantes. Este cálculo foi feito através do método variacional usando-se como função de onda tentativa uma combinacão linear de gaussianas,

dando excelentes resultados comparados aos experimentais.

Também a interação elétron-fonon foi investivada[28] neste sistema, concluindo-se que ela aumenta a energia de ligação, sendo mais evedenciada em poços estreitos e em densidades eletrônicas baixas, já que o efeito de blindagem aqui é importante. A blindagem eletrônica foi tratada por Brum et al.[27] que analisaram a energia de ligação do estado eletrônico fundamental em impurezas no poço quântico na presença de outros elétrons. Verificou-se que o efeito da blindagem eletrônica diminui em muito a energia de ligação (sem zera-la), atingindo uma saturação deste efeito para altas densidades de elétrons livres; fato este característico de sistemas bidimensionais.

Medidas com impurezas rasas começaram a ser publicadas logo após os primeiros trabalhos teóricos sobre este assunto. Dentre os métodos utilizados no tratamento experimental destacam-se a observação de transições óticas no infravermelho (Far infrared, FIR) e técnicas de espalhamento Raman ressonante (RRS). As amostras de GaAs-GaAlAs estudadas são dopadas com silício (impurezas rasas) geralmente em um intervalo de um terço da largura do poço, se localizando, ou no terço central, ou em uma das terças partes adjacentes às interfaces.

As primeiras medidas de magneto-espectroscopia FIR para estrutruras de MQW dopadas foram anunciadas por Jarosik et al.[11] e Mercy et al.[12] em 1983, mostrando-se em boa concordância com os resultados teóricos, particularmente com os de Greene e Bajaj[10].

Experimentos mais recentes[13,14] têm apresentado alguns problemas referentes à posição da dopagem no poço, pois tem-se observado que a impureza se difunde na direção de crescimento da amostra . Também o efeito da blindagem eletrônica tem sido alvo de investigações experimentais. Gammon et al.[15] notaram que para densidades de portadores livres da ordem de $10^{11}cm^{-2}$ a energia de transição 1s-2p+ sofre um deslocamento para o vermelho, fato que em outros experimentos[14] com a amostra iluminada (criando uma densidade eletrônica de aproximadamente $10^{9}cm^{-2}$) nada se havia observado. Tal efeito não está completamente entendido uma vez que a presença do campo magnético afeta os elétrons livres criando dificuldades no tratamento teórico.

Ainda com respeito a transições 1s-2p+ a altos campos magnéticos ($\approx$ 17 Tesla), Huant et al.[16] e Chang et al.[17] relataram as primeiras manifestações do magneto-polaron-ligado em estruturas de MQW; que aparece como um comportamento "pinning" na região ressonante das energias de transição. Cálculos teóricos recentes confirmaram este resultado experimental para estruturas MQW [18].

Já para medidas de RRS podemos dizer que a primeira evidência de estados ligados à impurezas rasas em MQW foi apresentada por Perry et al.[20] em 1985. Até então tal técnica era amplamente empregada no estudo dos "splittings" das subbandas de estruturas MQW's. No entanto, fazendo uso de uma amostra dopada com silício, Perry e seus colaboradores observaram um dubleto em

seu espectro, onde concluiram que o pico menos energético era devido a transições de elétrons livres (o splitting citado) e o mais energético atribuido a transição inter-subbanda do elétron ligado do estado fundamental da primeira subbanda para um (ainda não determinado) estado ligado da segunda subbanda. Medidas mais recentes de RRS feitas por Gammon et al.[15] mostraram algo diferente. Eles notaram que para densidades eletrônicas da ordem de $10^{11}cm^{-2}$ as posições dos picos no dubleto se invertem, ou seja, o pico mais energético agora é devido à transições de elétrons livres. Isto significa que o estado ligado da segunda subbanda tem maior energia de ligação que o da primeira subbanda. Tal fato na ocasião não foi convenientemente interpretado.

Neste trabalho estudamos um poço quântico simples de barreiras de potencial finitas dopado com uma única impureza doadora sob efeito da blindagem dos elétrons livres. Visamos com nossos cálculos esclarecer certas observações experimentais, particularmente as de Gammon[15], ainda obscuras. Para tanto, no Capítulo 1 descrevemos todo o tratamento teórico utilizado na obtensão das energias de ligação. No Capítulo 2 apresentamos uma discussão dos resultados, analisando a dependência das energias de ligacão para vários estados ligados com respeito à densidade eletrônica presente no poço e a influência da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs nestas energias. Continuamos no Capítulo 3 a analisar os resultados, agora com respeito à posição da impureza no poço, onde introduzimos as densidades de estados

calculadas por nós para vários estados e também várias densidades eletrônicas. Nossos resultados são ainda cofrontados com aqueles obtidos por RRS. A introdução do campo magnético no sistema é feita no Capítulo 4, onde analisamos as transições intra-subbandas sob o efeito da blindagem eletrônica na presença deste campo, comparando nossos resultados com aqueles obtidos através de medidas de magneto-espectroscopia FIR. Finalizamos apresentando nossas conclusões no Capítulo 5.

CAPÍTULO 1

DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

1.a - Poço Quântico sem impureza

Consideramos um poço quântico de GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ (x é a concetração de Al) de forma a termos uma camada de largura L de GaAs entre duas outras camadas semi-infinitas de GaAlAs. As interfaces criadas nestas junções são consideradas de extensões infinitas, abruptas na variação do material e livres de tensões. Tais simplificações não prejudicam nosso modelo em relação às amostras de MQW estudadas experimentalmente. Primeiro porque tais amostras são crescidas com barreiras de GaAlAs com larguras da ordem de 100Å, assegurando nossa escolha de poço simples já que observa-se pouca penetração da função de onda eletrônica nesta barreira. Também, em vista dos avanços nas técnicas de crescimento de hetero-junções semicondutoras, interfaces cada vez mais abruptas são obtidas pelos grupos experimentais; e ainda, a escolha do material GaAs-GaAlAs nos dá pouca tensão na interface devido ao bom casamento dos parâmetros de rede destes materiais.

A diferença de "gap" entre o GaAs e o GaAlAs dá origem a um potencial confinador de elétrons e buracos para estruturas crescidas em forma de sanduíche como descrito anteriormente. Este potencial tem a forma de poço, onde os portadores livres são

atraídos para dentro da camada de GaAs de largura L. Se esta largura for pequena o suficiente (L < 500 Å) efeitos quânticos tornam-se importantes e passamos a ter um gás de elétrons (ou buracos) quase- bidimensional. Para tratar este sistema quântico partimos da equação de massa efetiva, onde toda a contribuição da rede cristalina para o movimento eletrônico é tomada como uma variação na massa do elétron (chamada agora de massa efetiva). Consideramos, por enquanto, tal massa constante e depois analisaremos, em particular, o efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs. Esta massa efetiva é aquela do ponto Γ, $m_1 = 0.067\ m_o$ (onde m_o é a massa do elétron no vácuo). Como trabalhos anteriores[8,9] têm ressaltado, usaremos uma massa para o GaAlAs diferente daquela para o GaAs, $m_2 = (0.067 + 0.083\ x)\ m_o$.

Assim, na aproximação de massa efetiva, podemos começar a analisar o problema de um elétron em um poço de potencial retangular unidimensional de bandas achatadas, que representa o modelo mais simples para nossa hetero-junção semicondutora. Para este caso a equação de Shrödinger pode ser desacoplada em duas, uma para o movimento na direção do crescimento da amostra e a outra para uma direção perpendicular a esta. Nesta última o elétron estará livre para se mover num plano (xy digamos), já que seu hamitoniano é :

$$H_{xy} = -\frac{\hbar^2}{2\,m^*}\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right] \qquad (1)$$

onde o valor de m^* será interpletado mais adiante. Para este movimento temos as auto-energias contínuas :

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \tag{2}$$

sendo $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, e auto-funções do tipo partícula livre :

$$\psi_k \propto e^{i\vec{k}.\vec{\rho}} \tag{3}$$

onde $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. Aqui $\vec{k}$ é o vetor de onda do elétron no plano xy que serve também para identificar seu estado quântico no movimento planar. Falta ainda fornecer o estado de spin e o estado relacionado ao movimento na direção z para caracterizar por completo o estado eletrônico neste sistema.

Para o movimento na direção do potencial temos o hamiltonianp :

$$H_{z1} = - \frac{\hbar^2}{2 m_1} \frac{d^2}{dz^2} \qquad \text{(dentro do poço)} \tag{4a}$$

$$H_{z2} = - \frac{\hbar^2}{2 m_2} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 \qquad \text{(fora do poço)} \tag{4b}$$

onde V_0 é o potencial da barreira tomado como 60% da diferença de gap entre os materiais GaAs e GaAlAs; $V_0 = 0.6\ (1040\ x + 470\ x^2)$meV. As soluções deste problema são obtidas pela imposição da

continuidade da função de onda e sua derivada primeira nas interfaces, encontrando como auto-funções :

$$(1^{\underline{o}} \text{ subbanda}) \quad \xi_1(z) = \begin{cases} A_1\cos(k_1L/2)\exp[k_2(L/2+z)] \\ A_1\cos(k_1z) \\ A_1\cos(k_1L/2)\exp[k_2(L/2-z)] \end{cases} \tag{5a}$$

$$(2^{\underline{o}} \text{ subbanda}) \quad \xi_2(z) = \begin{cases} -A_2\mathrm{sen}(k'_1L/2)\exp[k'_2(L/2+z)] \\ A_2\mathrm{sen}(k'_1z) \\ A_2\mathrm{sen}(k'_1L/2)\exp[k'_2(L/2-z)] \end{cases} \tag{5b}$$

sendo A_1 e A_2 calculados para normalizar estes estados. Os valores dos k's em (5) são obtidos das equações transcendentais[a] :

$$m_1k_2 = m_2k_1\mathrm{tg}(k_1L/2) \tag{6a}$$

$$m_1k'_2 = -m_2k'_1\mathrm{cotg}(k'_1L/2) \tag{6b}$$

As auto-energias das subbandas deste problema ficam, então, dadas por :

$$E_1 = k_1^2 \tag{7}$$

$$E_2 = k_1'^2 \tag{8}$$

, onde todo este procedimento poderia se estender para o cálculo das subbandas superiores se elas existirem; o que só depende da

altura das barreiras de potencial e da largura do poço.

Podemos, enfim, identificar as subbandas como o estado quântico que caracteriza o movimento na direção z. Compondo os movimentos temos as auto-funções para o problema geral :

$$\psi_{i,\vec{k}} \propto \xi_i(z)\, e^{i\vec{k}.\vec{\rho}} \tag{9}$$

sendo i o índice das subbandas; e também para a energia :

$$E_{i,\vec{k}} = E_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2\, m_1} \tag{10}$$

Vemos em (10) que usamos m_1 ao invés de m^* como feito em (2). A rigor, m^* deveria ser usada[8], dando a contribuição da massa m_2 ao movimento no plano. No entanto, mantemos m_1 por não estarmos tratando de poços muito estreitos (< 50Å), onde tal contribuição se faz notar mais fortemente. Assim a diferença das massas em nosso cálculo entra apenas na determinação dos níveis de energias das subbandas, eq.(6) (7) e (8).

A presença de outros elétrons no poço, como também de impurezas nas barreiras resultante de dopagens moduladas, causa o entortamento das bandas do nosso potencial retangular. Cálculos[21] perturbativos têm mostrado que sob estas condições os níveis de energias das subbandas sofrem um aumento significativo, sendo mais evidente para as subbandas de menor energia. Em nosso tratamento não levamos em consideração tal correção por estarmos interessados

nas energias de ligação e não nos "splittings" das subbandas. No entanto, tal resultado afeta de modo particular a análise do efeito da não-parabolicidade na energia de ligação, o que voltaremos a discutir em momento apropriado.

1.b - Poço quântico com impureza rasa doadora.

Continuando com a atenção voltada para o poço quântico de $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ descrito anteriormente, vamos agora introduzir neste sistema uma impureza rasa doadora e analisar a energia de um elétron ligado a esta impureza.

Com a impureza localizada na posição $z = z_0$ no poço, o hamiltoniano toma a forma :

$$H = H_z(z) + H_{xy} + V_I^S(\rho, z-z_0) \quad , \tag{11}$$

onde H_{xy} é dado em (1) (e pode agora ser escrito em coordenadas cilíndricas para ganho de simplicidade), H_z é dado em (4) e V_I^S sendo o potencial coulombiano atrativo da impureza, blindado pelos elétrons livres presentes no sistema. Esta blindagem é considerada na aproximação RPA e será descrita mais adiante em detalhes.

Podemos no momento ainda afirmar que o potencial blindado mantém apenas a dependência na variável $r = \sqrt{\rho^2 + (z-z_o)^2}$.

O hamiltoniano (11) é claramente não separável e de solução analítica impossível. Assim sendo, usaremos o método variacional para a obtensão das energias de ligação.

As funções de onda tentativas são aquelas que se mostram mais apropiadas à condição de estados ligados à impurezas rasas, ou seja, funções hidrogenóides ou gaussianas. Trabalhos anteriores[22] mostraram que soluções de variáveis não separáveis, tipo $\sqrt{\rho^2+(z-z_o)^2}$, apresentam resultados que não diferem muito das soluções separáveis nas variáveis ρ e $(z-z_o)$ se o poço não for muito largo ($L < 3\, a_o^*$, para $V_o = \infty$ e $a_o^* = 103$ Å no GaAs). Esperamos que o mesmo valha para poços de barreiras de potencial finitas. Assim, fazendo uso do método variacional, temos as funções tentativas tipo hidrogenóides para estados ligados no plano xy :

$$\text{(tipo - 1s)} \quad \Phi^{1s}(\rho) = \frac{b_1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-b_1\rho/2) \tag{12a}$$

$$\text{(tipo - 2p}\pm\text{)} \quad \Phi^{2p\pm}(\rho,\varphi) = \frac{b_2^2}{\sqrt{12\pi}} \rho \exp(-b_2\rho/2)\, e^{\pm i\varphi} \tag{12b}$$

sendo b_1 e b_2 parâmetros variacionais. Os estados ligados são

considerados como funções separáveis da forma :

$$\psi_i^A(\rho,\varphi,z) = \xi_i(z)\ \Phi^A(\rho,\varphi) \qquad (13)$$

onde $\xi_i(z)$ são as auto funções do poço retangular dadas pelas equações (5).

Vemos por (13) que a função variacional é definida apenas no plano xy, sendo, na direção z, a mesma solução do problema sem impureza. Este desacoplamento, como já dissemos, é aceitável para poços não muito mais largos que $3a_0^*$. Isto é compreenssível, pois em poços maiores que este limite a função de onda (13) necessitaria de uma componente em z que "prendesse" o elétron à impureza, como fazem as funções (12), o que não é necessário para poços estreitos onde as funções $\xi_i(z)$ desempenham este papel.

Calculando o valor esperado do hamiltoniano (11) com a função de onda (13) e minimizando esta expressão em termos dos parâmetros variacionais obtemos a energia de ligação. O valor esperado de $H_z(z)$ resulta justamente a energia da subbanda i considerada, que subtraída do valor esperado de H nos dá a energia de ligação para o estado em questão. Por este motivo dissemos anteriormente não ter grande importância a determinação exata destes níveis energéticos no cálculo das energias de ligação, o que não ocorre quando tratamos a não-parabolicidade e as energias envolvidas em transições inter-subbandas. Já o valor esperado de

H_{xy} nos dá o termo cinético no plano, isto é, $b_i^2/4$ para ambas expressões (12) de Φ (já dimensionalisado em valores de Ry^*=5.3meV e a_0^*). Para V_I^S obtemos grande simplificação no cálculo dos valores esperados pela imposição da separabilidade das funções de onda nas variáveis ρ e $(z-z_0)$, pois tomando este potencial blindado na forma de sua transformada de Fourier bidimensional :

$$V_I^S(\rho, z-z_0) = \sum_{\vec{q}} V_I^S(\vec{q}, z-z_0) \exp(i\,\vec{q}.\vec{\rho}) \qquad (14)$$

e calculando seu valor esperado obtemos :

$$\langle \Phi^{1S}\xi_i | V_I^S(\rho, z-z_0) | \Phi^{1S}\xi_i \rangle = -1/\Pi \int_0^\infty b_1^3 (b_1^2+x^2)^{-3/2} V_{ii}(x) \times dx \qquad (15a)$$

$$\langle \Phi^{2p\pm}\xi_i | V_I^S(\vec{\rho}, z-z_0) | \Phi^{2p\pm}\xi_i \rangle = -1/\Pi \int_0^\infty \frac{b_2^3(2b_2^2-3x^2)}{2(x^2+b_2^2)^{7/2}} V_{ii}(x) \times dx \qquad (15b)$$

(dimensionalisados em Ry^* e a_0^*). Vemos que não mais precisamos do valor de $\langle \xi_i | V_I^S(\vec{\rho}, z-z_0) | \xi_i \rangle$ mas sim de $V_{ii} = \langle \xi_i | V_I^S(\vec{q}, z-z_0) | \xi_i \rangle$, que é dado dentro da aproximação RPA com a introdução da função dielétrica como veremos adiante.

Apenas reagrupando os termos dos valores esperados já calculados, obtemos a energia de ligação do elétron na subbanda i

e estado A (A = 1s,2p±) preso à impureza rasa no poço quântico :

$$E_i^{1s} = b_1^2/4 - 1/\Pi \int_0^\infty b_1^3 (b_1^2+x^2)^{-3/2} V_{ii}(x)\, x\, dx \qquad (16a)$$

$$E_i^{2p\pm} = b_2^2/4 - 1/\Pi \int_0^\infty \frac{b_2^3(2b_2^2-3x^2)}{2(x^2+b_2^2)^{7/2}} V_{ii}(x)\, x\, dx \qquad (16b)$$

Sendo a forma analítica de $V_{ii}(x)$ algo complicada, as integrais nas expressões acima são feitas numericamente pelo método de Gauss-Legendre, sendo as energias minimizadas, em termos dos parâmetros variacionais.

1.c - Blindagem eletrônica do potencial da impureza na aproximação das fases aleatórias (RPA).

Para completar o cálculo das energias de ligação falta fornecermos os elementos de matrizes $V_{ii}(x)$ para as equações (16). Estes elementos nada mais são que as transformadas de Fourier bidimensional do elemento de matriz $\langle \xi_i | V_I^S(\vec{\rho}, z-z_0) | \xi_i \rangle$. Isto é

feito aqui no formalismo RPA.

Em nosso problema o elétron pode pertencer a primeira ou segunda subbanda, deixando os índices i assumirem os valores 1 e 2. Também os elétrons livres que blindam o potencial da impureza podem ocupar estas duas subbandas, o que nos leva a considerar a teoria de blindagem eletrônica em sistemas com muitas subbandas. Siggia e Kwok[23] já trataram este problema de forma geral e também o aplicaram para a estrutura MOS. Acreditando ser este tratamento um pouco geral e suscinto demais, o consideramos aqui em detalhe para o nosso poço quântico. Fazemos isto de uma maneira um pouco diferente daquela feita por aqueles autores, utilizando, agora, um enfoque via matrix densidade[24].

Ainda com o sistema de poço quântico com uma impureza, podemos reescrever o hamiltoniano (11) como :

$$H = H_o(z) + V(\vec{r},t) \tag{17}$$

onde H_o trata do problema dos elétrons livres no poço (eq.(1),(4)) e $V(\vec{r},t)$ dá o potencial da impureza, considerado como um termo perturbativo. A dependência em t é tomada como $e^{-i\omega t}$ para uma dedução mais geral, e no final fazemos $\omega = 0$ para reobter nosso caso de interesse. Como vimos na primeira parte deste capítulo, H_o tem como equação de auto-valor :

$$H_o(z)|n,\vec{k}\rangle = E_{n,\vec{k}}\,|n,\vec{k}\rangle \tag{18}$$

sendo $E_{n,\vec{k}}$ dado em (10), com n se referindo à subbanda e $\vec{k}$

representando o vetor de onda planar do elétron.

O operador densidade para o sistema não perturbado, $H = H_o$, é definido da seguinte maneira :

$$\eta_o |n,\vec{k}\rangle = f(E_{n,\vec{k}}) \; |n,\vec{k}\rangle \tag{19}$$

com $f(E_{n,\vec{k}})$ sendo a distribuição eletrônica de Fermi-Dirac, à $T = 0$ K, valendo zero se a energia de Fermi (E_F) for menor que E_n, zero também se $E_{n,\vec{k}}$ for maior que E_F e 1 se E_F estiver entre E_n e $E_{n,\vec{k}}$. Tomamos $E_F = E_1 + 2\Pi \, Ns_1$ se somente a primeira subbanda estiver ocupada e $E_F = E_1 + 2\Pi \, Ns_1 = E_2 + 2\Pi \cdot Ns_2$ se a segunda subbanda também estiver ocupada (Ns_i é a densidade eletrônica da subbanda i).

Com a introdução da perturbação no sistema observamos uma variação $\delta\eta$ na densidade eletrônica :

$$\eta = \eta_o + \delta\eta \; . \tag{20}$$

Assumindo que $\delta\eta$ tenha a mesma dependência temporal que o potencial $V(\vec{r},t)$, ou seja $e^{-i\omega t}$, podemos desenvolver a equação de movimento para esta densidade ($i\dot{\delta\eta} = [H,\delta\eta]$) desprezando temos da ordem $V\delta\eta$:

$$(E_{n,k+q} - E_{n',k} + \omega)\langle n'\vec{k}|\delta\eta|n\;\vec{k}+\vec{q}\rangle = [f(E_{n,k+q}) - f(E_{n',k})]\langle n'\vec{k}|V|n\;\vec{k}+\vec{q}\rangle \; . \tag{21}$$

Somando esta expressão para todos os vetores de onda $\vec{k}$ para obtemos a densidade total do sistema chegamos a uma equação que relaciona os elementos de matrizes das transformadas de Fourier bidimensionais de $\langle \vec{r} \mid \delta\eta \mid \vec{r} \rangle$ e $\langle \vec{r} \mid V \mid \vec{r} \rangle$, $\delta\eta(\vec{q})$ e $V(\vec{q},z)$, respectivamente :

$$\langle n' \mid \delta\eta(\vec{q}) \mid n \rangle = \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f(E_{n,k+q}) - f(E_{n'k})}{E_{n,k+q} - E_{n'k} + \omega} \right] \langle n' \mid V(q,\vec{z}) \mid n \rangle \qquad (22)$$

Podemos, ainda, reescrever $\delta\eta$ como :

$$\delta\eta = \sum_{\substack{n'n \\ \vec{k}\ \vec{q}}} |n'\vec{k}\rangle\langle n'\vec{k}| \ \delta\eta \ |n,\vec{k}'+\vec{q}\rangle\langle n,\vec{k}'+\vec{q}| \qquad (23)$$

que nos fornece $\langle \vec{r} \mid \delta\eta \mid \vec{r} \rangle$ da forma :

$$\delta\eta(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} \sum_{\substack{n'n \\ k}} \xi_{n'}(z)\ \xi_{n}(z)\ \langle n'\vec{k} \mid \delta\eta \mid n,\vec{k}+\vec{q} \rangle \ . \qquad (24)$$

Apartir das equação (24) e (23) inferimos que :

$$\delta\eta(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} \sum_{n'n} \Pi_{nn'}(q,\omega) \quad V_{nn'}(\vec{q}) \tag{25}$$

onde $V_{nn'} = \langle n'|V(\vec{q},z)|n\rangle$ é o potencial efetivo procurado e $\Pi_{nn'}$ a matriz polarização, definida como :

$$\Pi_{nn'}(q) = \sum_{k} \left[\frac{f(E_{n,k+q})-f(E_{n'k})}{E_{n,k+q}-E_{n'k}+\omega} \right] \tag{26}$$

Para relacionar o potencial efetivo com o potencial externo (V^{ext}) da impureza sem blindagem, notamos que :

$$V(\vec{q},z) = V^{ext}(\vec{q},z) + V^{ind}(\vec{q},z) \quad . \tag{27}$$

Em nosso caso, o potencial induzido é dado por :

$$V^{ind}(\vec{\rho},z) = \int\int d\rho^2 dz' \frac{\delta\eta(\vec{\rho},z')}{\sqrt{(\vec{\rho}-\vec{\rho}')^2+(z-z')^2}} \quad . \tag{28}$$

Na teoria da resposta linear, o potencial induzido é proporcional ao potencial efetivo (aproximação RPA),

$$V^{ind}_{n'n}(\vec{q}) = \langle n' | V^{ind}(\vec{q},z) | n \rangle = \sum_{rs} \chi_{n'n,rs}(\vec{q})\ V_{rs}(\vec{q}) \ . \qquad (29)$$

Finalmente obtemos,

$$V^{ext}_{n'n}(q) = \sum_{rs} \varepsilon^{RPA}_{n'n,rs}(q)\ V_{rs}(q) \qquad (30)$$

onde definimos a função dielétrica na aproximação RPA como :

$$\varepsilon^{RPA}_{n'n,rs}(q) = \delta_{n',r}\delta_{n,s} - \chi_{n'n,rs}(q) \qquad (31)$$

e a função sucetibilidade χ como :

$$\chi_{n'n,rs}(q) = 2\int d^2\rho \quad e^{i\vec{q}.\vec{\rho}} \iint dz\ dz' \frac{\xi_n(z)\xi_{n'}(z)\xi_r(z')\xi_s(z')}{\sqrt{\rho^2+(z-z')^2}}\ \Pi_{rs}(\vec{q}).$$

(32)

Devido à paridade exibida pelas funções de onda $\xi_n(z)$ para o poço quântico diversos valores de χ se anulam, simplificando o sistema de equações (30). Consideramos ainda zero toda polarização Π que inclua uma subbanda desocupada, o que equivale a tornar desprezível todo espalhamento de elétrons de uma subbanda a outra pelo potencial da impureza. Assim, nossa equação (30) se transforma em um sistema linear de equações de dimensão

2x2, já que estamos interessados nas duas primeiras subbandas ocupadas. Deste sistema, dado os potenciais externos $V_{11}^{ext}, V_{12}^{ext} = V_{21}^{ext}$ e V_{22}^{ext}, podemos obter os potenciais efetivos V_{11} e V_{22} que necessitamos em (16) para o cálculo das energias de ligação.

1.d - Tratamento da contribuição da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs para a energia de ligação.

O efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs na energia de ligação é considerado de maneira idêntica àquela inicialmente descrita por Chaudhuri e Bajaj[6] para problemas de estados ligados em poços quânticos. Eles fizeram uso da seguinte expressão para a massa efetiva m_i em função da energia da subbanda i que contém o estado ligado :

$$m_i/m_o = (0.067 + 0.0436\ E_i + 0.236\ E_i^2 - 0.147\ E_i^3)\ , \qquad (33)$$

com E_i em elétron-volts. Esta expressão foi proposta por Kolbas[25] que a obteve por interpolação dos resultados de perturbação $\vec{k}.\vec{p}$ para uma temperatura de 77K. Mesmo que esta não seja a temperatura que usualmente se realiza experimentos ($T \cong 4.2K$) isto não afeta

muito nossos resultados já que a variação na expressão (33) é pequena entre estes valores de temperatura. Ainda, devemos mencionar que há uma restrição ao uso de (33) quanto aos valores de E_i , que devem ser menores que 300 meV. Em nosso caso de poço não muito estreito (maiores que 50 Å) certamente esta restrição é respeitada.

Para a utilização de (33) calculamos primeiro a energia da subbanda que contém o estado ligado de interesse, através das equações transcedentais (6). Depois, utilizamos esta energia para o cálculo das novas massas m_1 (por (33)) e m_2 , com as quais voltamos a resolver as equações (6). Desta maneira procedemos auto-consistentemente até obtermos um valor final estável para a energia da subbanda e para a massa efetiva , que é usada no cálculo na energia de ligação do elétron pertencente à subbanda em questão.

Como veremos no capítulo seguinte, o efeito da não-parabolicidade aumenta a energia de ligação, abaixando ainda mais o nível energético do estado ligado em relação à energia da subbanda (E_i). A rigor deveriamos utilizar aquele nível de estado ligado para o cálculo da massa efetiva m_1 por (33) e proceder auto-consistentemente com esta energia. Não fizemos desta maneira por dois motivos : primeiro pelo tempo de uso do computador que este processo utilizaria, e segundo, e mais importante, pelo fato de que nosso nível E_i não é precisamente determinado, pois omitimos em nosso tratamento o efeito de entortamento das bandas

de condução dos materiais GaAs-GaAlAs devido tanto à presença de elétrons no poço quanto à de impurezas no sistema.

Fishman[21] realizou um cálculo perturbativo onde observou que este entortamento de bandas contribuia para elevar os níveis energéticos das subbandas. Este efeito era significativo a altas densidades eletrônicas, sendo mais evidente na primeira subbanda que na segunda. Como exemplo podemos citar alguns de seus resultados para um poço de largura de 204Å e barreiras de potencial V_0 = 190 meV . A primeira subbanda com tratamento de bandas achatadas se localizava a uma energia de 9,6 meV acima do fundo da banda de condução do GaAs. Para uma densidade de $4,2.10^{11}cm^{-2}$ dentro do poço, o entortamento das bandas elevou este nível para 25,8 meV. Analogamente para a segunda subbanda foram encontrados os respectivos valores de 38,3 meV e 49,5 meV. Vemos assim que a omissão do tratamento rigoroso de considerar o nível energético do estado ligado ao invés do nível da subbanda é compensado, em parte, também pela omissão da inclusão de efeitos de entortamento de bandas.

Obviamente preferiríamos não omitir nenhuma destas questões, porém a inclusão do efeito de muitos corpos que entorta as bandas de condução é algo extenso e complexo, que esperamos seja incluido em um cálculo futuro.

CAPÍTULO - 2

Energia de ligação com a impureza no centro do poço.

Neste capítulo analisamos a energia de ligação de um elétron preso a uma impureza rasa doadora no centro do poço quântico, sendo sua dependência com a densidade de elétrons livres neste sistema particularmente investigada.

2.a - Densidade eletrônica ocupando apenas a primeira subbanda.

Se a densidade de elétrons presentes no sistema não for muito alta ($< 10^{11} cm^{-2}$) teremos apenas a primeira subbanda populada. Estamos considerando aqui o limite quântico para baixas temperaturas ($T \simeq 0$ K) no qual todos os elétrons estão dentro do círculo (bidimensional) de Fermi de raio $k_F = \sqrt{2\Pi Ns}$, sendo Ns a densidade eletrônica. Se esta densidade for aumentada, então $E_F = E_1 + \frac{\hbar k_F^2}{2m}$ atingirá o nível da segunda subbanda (E_2), iniciando seu preenchimento.

Estamos interessados, no momento, na análise do sistema com apenas a primeira subbanda ocupada, com o que podemos tirar proveito da simplicidade para o estudo dos efeitos de blindagem

eletrônica da impureza. Nesta circunstância podemos facilmente inverter o sistema de equações (30) para a obtensão do potencial efetivo V_{ii} :

$$V_{ii}(q) = \frac{V_{ii}^{ext}(q)}{\varepsilon_{iiii}(q)} \tag{35}$$

onde $V_{ii}^{ext}(q)$ é a transformada de Fourier bidimensional de $V_{ii}^{ext} = \langle \xi_i(z) | V_I(\rho, z-z_0) | \xi_i(z) \rangle$ e

$$\varepsilon_{iiii}(q) = 1 + 2/q\ \Pi_{ii}(q)\ F_{iiii}(q) \tag{36}$$

(já dimensionalisado em termos de R_y^* e a_0^*) sendo Π definido em (26) e F dado em meio a expressão (32), que destacamos aqui como :

$$F_{ijlm}(q) = \int_0^\infty \int_0^\infty dz dz' \xi_i(z) \xi_j(z) \xi_l(z) \xi_m(z)\ \exp(-q|z-z_0|) \ . \tag{37}$$

Ainda há uma ressalva ao uso de (35), pois para sua obtensão desprezamos termos de espalhamento para subbandas vazias, ou seja, $\Pi_{ij} = 0$ para $j \neq 1$; o que nem sempre é verdade. No entanto, tais termos são ordens de grandeza menores que Π_{ii} ($\Pi_{ii} \approx 1$, já $\Pi_{12} \approx 10^{-7}$) , e ainda não contém a unidade aditiva como ε_{iiii}, eq(36). Logo a omissão de tais termos não-diagonais não deve afetar significantemente os resultados obtidos pelo uso desta aproximação.

Voltando à equação (35), vemos que a dependência de Π e F com $\mathbf{q}$ deve determinar a ação da blindagem eletrônica na energia de ligação. Olhando primeiramente para F, notamos por (37) que estes fatores de forma têm um comportamento limite bem definido, tendendo a 1 para $\mathbf{q}$ indo a zero e indo a zero para $\mathbf{q}$ infinito. Para exemplificar mostramos na figura 1 os fatores de forma F_{1111}, F_{2211}, F_{2222}, necessários para o tratamento de até duas subbandas ocupadas, em função de $\mathbf{q}$. Notamos que eles são bem similares, e um cálculo qualitativo poderia usar apenas um deles, F_{1111} digamos, para o estudo do sistema de várias subbandas ; simplificando em muito o trabalho a ser feito. Não fizemos isto por não ter tal informação de ante-mão, e acabamos por calcular todos estes fatores; ganhando, no entanto, em precisão nos resultados.

Devemos observar que os fatores de forma somente dependem das dimensões do poço, ou seja, sua largura e suas barreiras de potencial, sendo toda dependência com a densidade eletrônica contida em Π. O comportamento deste termo em função de $\mathbf{q}$ é ilustrado na figura 2 para Π_{11}, onde vemos que ele é igual a 1 para $\mathbf{q}$'s menores que $2k_F$ e vai a zero para valores maiores que este limite.

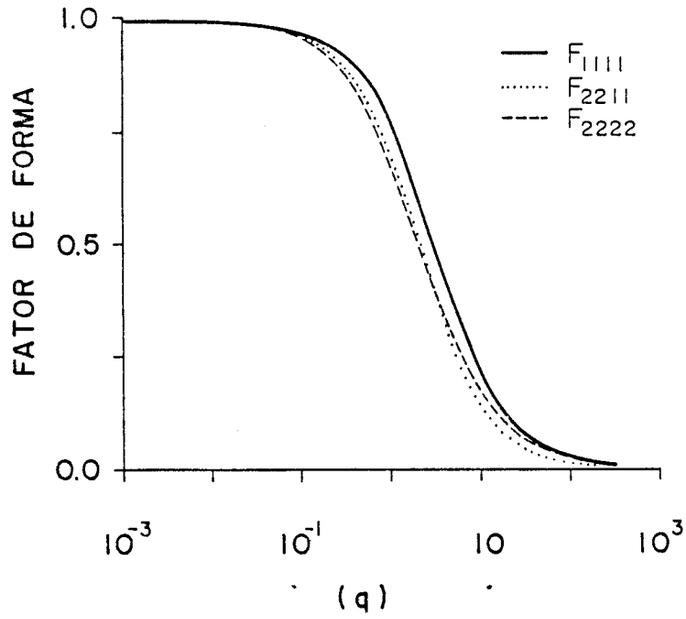

Figura 1 - Fatores de forma para um poço de **L** = 100 Å e x = 0,3.

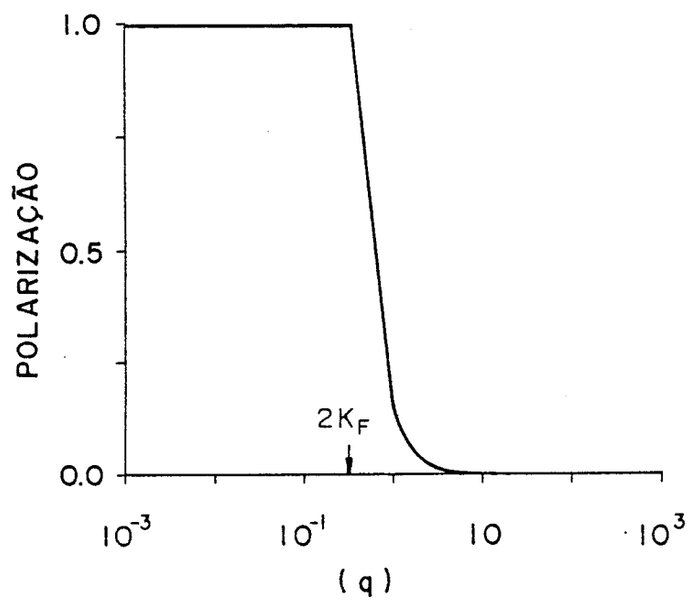

Figura 2 - Polarização $\Pi_{11}(q)$ para o mesmo poço da figura anterior e com Ns = $10^{10}cm^{-2}$.

Tendo em mente como F e Π variam com q, podemos voltar ao cálculo das energias de ligação. Primeiro dirigimos nossa atenção para o estado ligado do tipo 1s da primeira subbanda, encontrando uma dependência com a densidade eletrônica mostrada na figura 3 para um poço de largura L = 100Å e x = 0,3. Vemos nesta figura um comportamento, já observado por Brum et al[27], que consiste na diminuição da energia de ligação com o aumento da densidade de elétrons livres. Como vemos, este efeito de blindagem é significativo, diminuindo em aproximadamente oito vezes a energia de ligação.

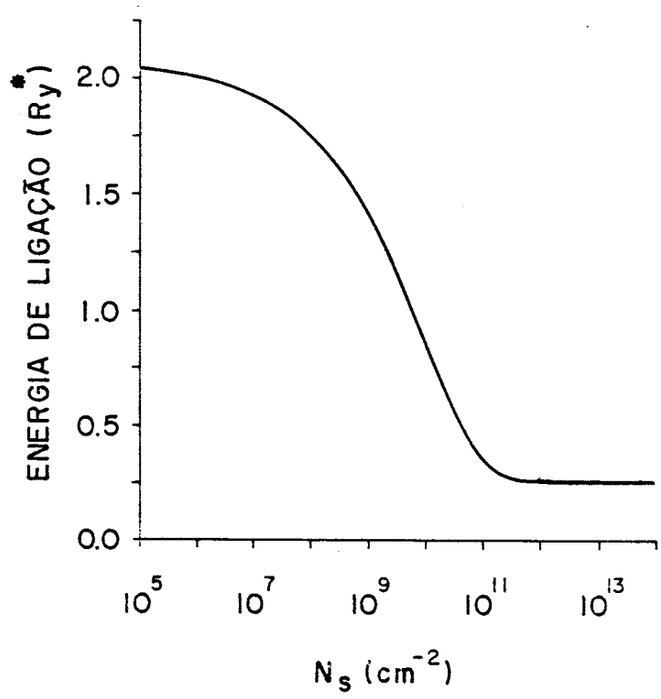

Figura 3 - Energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda (L = 100 Å , x = 0,3).

Algo interessante a ser notado é que a energia de ligação não vai a zero para altas densidades eletrônicas, como observado em sistemas tridimensionais ("bulk"), mas atinge um valor constante, indicando que o estado ligado ainda existe para estas altas densidades. Tal comportamento pode ser inferido da dependência de F e Π com q, haja visto que ε_{iiii} contribui com um fator aditivo da forma $\Pi(q)F(q)$ em (36). Este fator vai a zero para valores acima de $q \approx 100$, pois F(q) praticamente se anula, cortando toda a influência de $\Pi(q)$ para densidades Ns (ou k_F) que ultrapassem este valor limite. Isto acarreta, então, a não-dependência da energia de ligação com Ns para altas densidades eletrônicas.

Para o estado 2p± da primeira subbanda encontramos algo diferente. Podemos ver pela figura 4 (mesmo poço da fig.3) que a energia de ligação diminui até deixar de existir para densidades da ordem de $3.10^{8}cm^{-2}$. Neste caso a não obtensão de uma saturação na energia de ligação a altas densidades eletrônicas deve ser atribuida à baixa energia de ligação deste estado ainda a pequenas densidades Ns, onde o efeito de blindagem ainda é desprezívelem estados 1s. Com isto, a energia de ligação foi a zero antes mesmo de atingirmos o limite ($\approx 10^{12}cm^{-2}$) para o qual a densidade deixa de exercer influência sobre a energia. A inexistência deste estado para densidades acima de $10^{9}cm^{-2}$ ainda não foi observada experimentalmente. Até onde temos conhecimento este é o primeiro cálculo evidenciando este comportamento. Certos experimentos[14,15]

têm mostrado transições intra-subbanda 1s-2p± para densidades acima deste limite citado, o que não contradiz nossos resultados, pois neles são utilizados campo magnético aplicado sob a amostra de MQW, afetando tanto as energias dos elétrons livres (níveis de Landau), quanto a blindagem que eles exercem sob a impureza. Voltamos a discutir este ponto em um capítulo mais adiante.

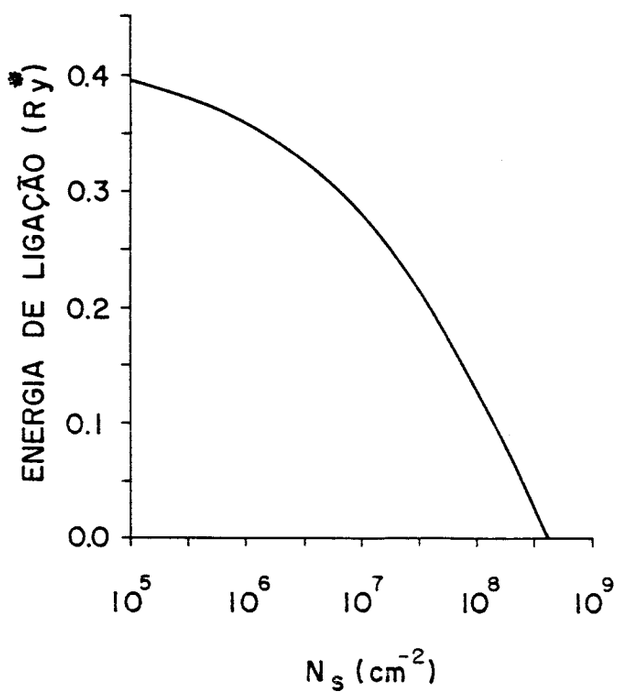

Figura 4 - Energia de ligação do estado 2p± da primeira subbanda (L = 100 Å , x = 0,3).

2.b - Ocupação da segunda subbanda.

Com o aumento da densidade eletrônica a segunda subbanda começa a ser populada por elétrons livres , os quais também contribuem para o efeito de blindagem. A ocupação da segunda subbanda, para T = 0 K, começa a ocorrer no momento em que o nível de Fermi atinge o nível energético desta subbanda, ou seja, $E_F = E_1 + 2\Pi\, Ns = E_2$. A partir deste ponto a densidade eletrônica se divide em duas, uma na primeira subbanda Ns_1 e outra na segunda Ns_2. O nivel de Fermi é dado, agora, por $E_F = E_1 + 2\Pi Ns_1 = E_2 + 2\Pi Ns_2$.

Com a ocupação da segunda subbanda temos que considerar o sistema de equações (30) de maneira mais geral. Como já dissemos, este sistema torna-se simples devido a paridade das funções $\xi(z)$ do poço e também devido às polarizações nulas decorrentes de subbandas desocupadas. Ficamos finalmente com um sistema 2x2 expresso matricialmente aquí por :

$$\begin{pmatrix} V_{11}^{ext} \\ V_{22}^{ext} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1111} & \varepsilon_{1122} \\ \varepsilon_{2211} & \varepsilon_{2222} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{11} \\ V_{22} \end{pmatrix} \qquad (38)$$

A inversão deste sistema é imediata, resultando os seguintes potenciais efetivos :

$$V_{11} = \frac{\varepsilon_{2222} V_{11}^{ext} - \varepsilon_{1122} V_{22}^{ext}}{\varepsilon_{1111} \varepsilon_{2222} - \varepsilon_{2211} \varepsilon_{1122}} \quad , \qquad (39a)$$

$$V_{22} = \frac{\varepsilon_{1111} V_{22}^{ext} - \varepsilon_{2211} V_{11}^{ext}}{\varepsilon_{1111} \varepsilon_{2222} - \varepsilon_{2211} \varepsilon_{1122}} \quad . \qquad (39b)$$

Se somente a primeira subbanda está ocupada, então $\varepsilon_{2222} = 1$, $\varepsilon_{1122} = 0$ e assim reobtemos (35) de (39a). Neste caso,

$$V_{22} = V_{22}^{ext} - \varepsilon_{2211} / \varepsilon_{1111} \, V_{11}^{ext} \qquad (40)$$

Fazendo uso da expressão (39a) para densidades acima de $10^{12} cm^{-2}$ podemos observar o efeito da ocupação da segunda subbanda na energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda. Isto é mostrado na figura 5 (mesmo poço da fig.3), onde vemos que para baixas densidades reobtemos a figura 3 e para altas densidades observamos um novo efeito de blindagem, decorrente da ocupação da segunda subbanda pelos elétrons livres. Notamos que este efeito aparece como uma certa descontinuidade na energia de ligação para valores de Ns nos quais já se havia observado uma saturação do efeito de blindagem. Esta descontinuidade aparece nesta figura devido à escala usada no eixo das densidades. Na verdade, o valor de Ns_2 necessário para se atingir uma nova saturação da blindagem é o mesmo que foi necessário na primeira subbanda, ou seja

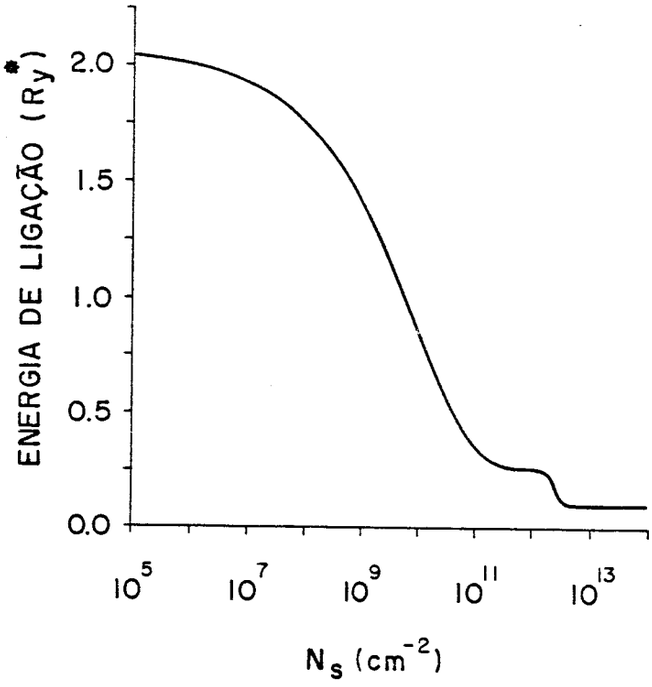

Figura 5 - Energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda com a ocupação da segunda subbanda (L = 100 Å , x = 0,3).

$\approx 10^{12} cm^{-2}$.

Ainda pela figura 5 vemos que um novo patamar foi atingido, no entanto, com energia mais baixa ($\approx$ 0.1 Ry^*). Se o sistema apresenta uma terceira subbanda (o que não acontece para este poço de L = 100Å e x = 0.3) esperamos que este processo se repita até, eventualmente, a energia de ligação ir a zero ou a um valor desprezível em condições experimentais.

Para o estado 2p± da primeira subbanda nada de novo ocorre, uma vez que a energia de ligação se anula para valores de

densidade eletrônica insuficientes para a ocupação da segunda subbanda.

Analisamos agora o efeito da densidade eletrônica nas energias de ligação para estados ligados da segunda subbanda. Para tanto, faremos uso do potenial efetivo V_{22} (eq.(39b)) nas expressões variacionais (16). Como resultado, podemos ver pela figura 6 (linha cheia) a energia de ligação de um estado do tipo 1s da segunda subbanda. Observamos que o comportamento desta energia com Ns é bem similar àquele exibido para este mesmo tipo de estado na primeira subbanda (fig.5), tendo como mais marcante diferença o fato de que este estado apresenta menores energias de ligação que os estados referentes à primeira subbanda. Pode parecer intuitivo, mas, como veremos no capítulo seguinte, isto nem sempre ocorre se a posição da impureza não for mais o centro do poço.

Da figura 6 vemos que a segunda saturação, decorrente da ocupação da segunda subbanda, se dá a um nível energético muito pequeno, o que em condições mais realistas nas amostras estudadas experimentalmente deve significar a não observação deste estado ligado nestas circunstâncias. Também, como veremos adiante, a introdução da não-parabolicidade e a localização da impureza fora do centro do poço deve aumentar a energia deste estado, tornando possível sua observação.

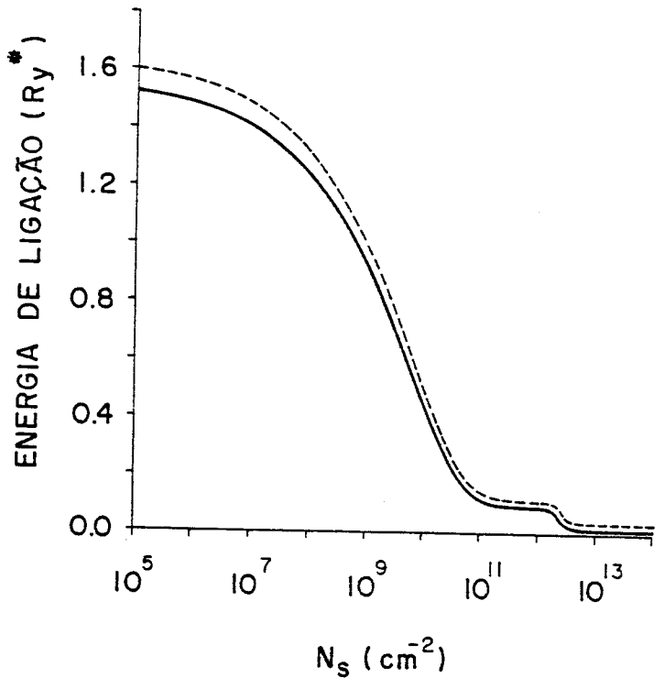

Figura 6 - Energia de ligação do estado 1s da segunda subbanda, sendo a linha em tracejado obtida com o efeito da não-parabolicidade levado em consideração (L = 100 Å , x = 0,3).

Para o estado ligado 2p± referente à segunda subbanda encontramos uma dependência da energia de ligação com a densidade eletrônica quase idêntica àquela observada para a primeira subbanda. Vemos na figura 7 (linha cheia) que este estado também não sobrevive ao aumento da densidade Ns , indo a zero para valores acima de $\approx 3.10^8 cm^{-2}$. Os valores encontrados aqui são apenas um pouco menores que os encontrados anteriormente para este tipo de estado na primeira subbanda, indicando sua pouca

dependência com a subbanda da qual faz referência. Como veremos, este tipo de estado também é pouco dependente da posição em que se localiza a impureza no poço.

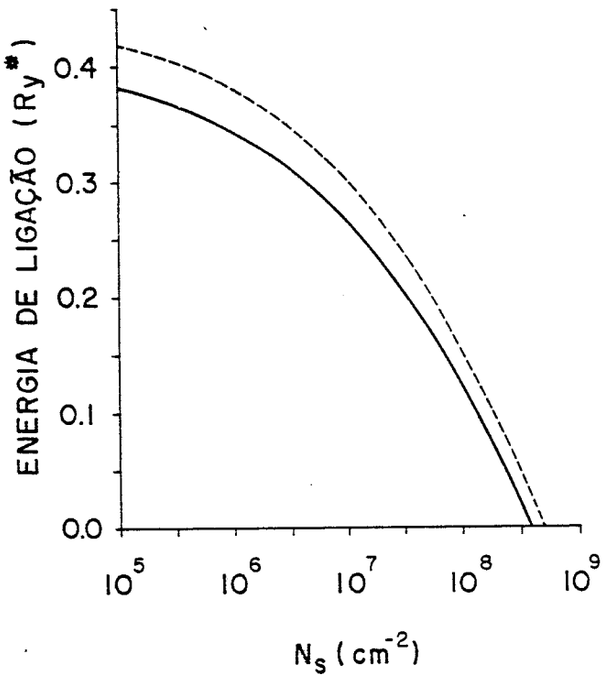

Figura 7 - Energia de ligação do estado 2p± da segunda subbanda, onde novamente o efeito da não-parabolicidade é mostrado na linha em tracejado (L = 100 Å , x = 0,3).

2.c - Efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs nas energias de ligação.

Incluimos o efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs como uma mudança nas massas efetivas m_1 e m_2 da mesma maneira já descrita na seção d do capítulo 1. Faltou mencionar naquele ponto que as equações (16) sofrem uma pequena modificação no termo cinético $b_i^2/4$, que agora deve ser multiplicado por $0.067/m_1$, apenas por questões de dimensionalização. Também, lá havíamos visto que m_1 era função da energia em que se encontrava a subbanda do estado ligado sob estudo, sendo tal massa tanto maior quanto maior era esta energia. Assim, é de se esperar que o efeito da não-parabolicidade seja mais pronunciado para subbandas excitadas e para poços estreitos. Desta maneira, escolhemos um poço relativamente estreito de L = 100Å e estados ligados da segunda subbanda para a análise deste efeito.

Como resultado de nossos cálculos mostramos nas figuras 6 e 7 (linha tracejada) o efeito da não-parabolicidade em um poço de L = 100Å e x= 0.3 em estados ligados da segunda subbanda. Vemos nestas figuras que as energias de ligação sofrem um aumento com a inclusão da não-parabolicidade. Para os estados ligados deste poço, mas pertencentes à primeira subbanda, observamos um aumento bem mais discreto e não o mostramos nas figuras 4 e 5, já que uma curva quase se sobrepõe à outra.

Como já dissemos, estamos desprezando o efeito de entortamento das bandas devido à presença de elétrons livres no sistema. Este efeito eleva[21] os níveis de energia das subbandas, o que deve reforçar o efeito da não-parabolicidade, principalmente para altas densidades eletrônicas. Infelizmente não nos foi possível tratar tal efeito devido sua complexidade. Uma maneira que poderíamos enfocar tal assunto seria a de, através de teoria de perturbação de primeira ordem[21], encontrar as novas auto-energias das subbandas com a presença na hamiltoniana do termo de muitos corpos. Dada esta energia, a usaríamos para a determinação de $m_i(E)$ que seria a massa a ser considerada em todo o cálculo subsequente. Porém, uma dificuldade surge na resolução das equações transcendentais (6), pois k_i^2 e $k_i'^2$ não mais necessariamente correspondem às auto-energias já corrigidas pelos termo de muitos corpos, ou melhor, necessitaríamos tratar o problema em segunda ordem de perturbação para uma melhor escolha dos k's que são essencias em todo o cálculo. Uma maneira alternativa de se estudar o entortamento das bandas é considerar funções variacionais também na direção z, e fazer a minimização da energia com o termo de muitos corpos incluido no hamiltoniano.

À frente destas dificuldades expostas, devemos salientar que o efeito da não-parabolicidade na energia de ligação de impurezas rasas em poços quânticos ainda permanece em aberto devendo ser tratado de forma mais conveniente na presença de elétrons livres no poço. O que fizemos apenas indicou que a

energia de ligação sofre um aumento quando este efeito é considerado, sendo este aumento mais evidente em subbandas excitadas e em poços estreitos.

2.d - Dependência da energia de ligação com a largura do poço.

Damos aqui uma breve explanação do efeito da largura L do poço nas energias de ligação. Primeiro consideramos o poço na ausência de elétrons livres (Ns= 0), para em seguida considerar o efeito da blindagem em função de L.

Nas figuras 8a e 8b vemos as energias dos estados ligados do tipo 1s e 2p±, respectivamente, à densidade eletrônica nula. As energias de ligação são plotadas em função da largura do poço para barreiras de potencial definidas com x = 0.1 e 0.3; onde mostramos os estados ligados pertencentes às duas primeiras subbandas. De um modo geral este comportamento observado já é bem entendido[4,5], ou seja, a energia de ligação cresce com o estreitamento do poço até atingir um máximo e então decresce rapidamente. Esta diminuição é associada ao "vazamento" da função de onda eletrônica pelas barreiras de potencial quando o poço é muito estreito. Este vazamento ocorre em maiores valores de L para os estados da segunda subbanda por se tratarem de estados mais extensos em z e com nível energético perto do topo do poço.

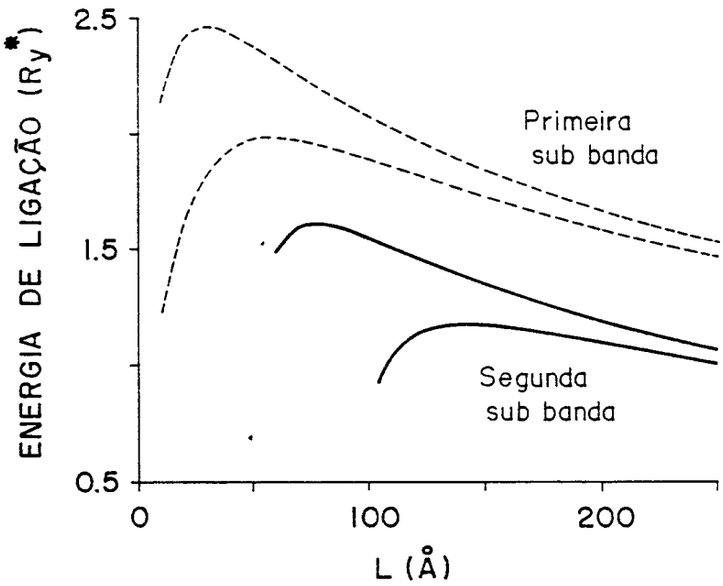

Figura 8a - Energias do estado 1s. As curvas superiores para cada subbanda são obtidas com x = 0,3 e as inferires com x = 0,1.

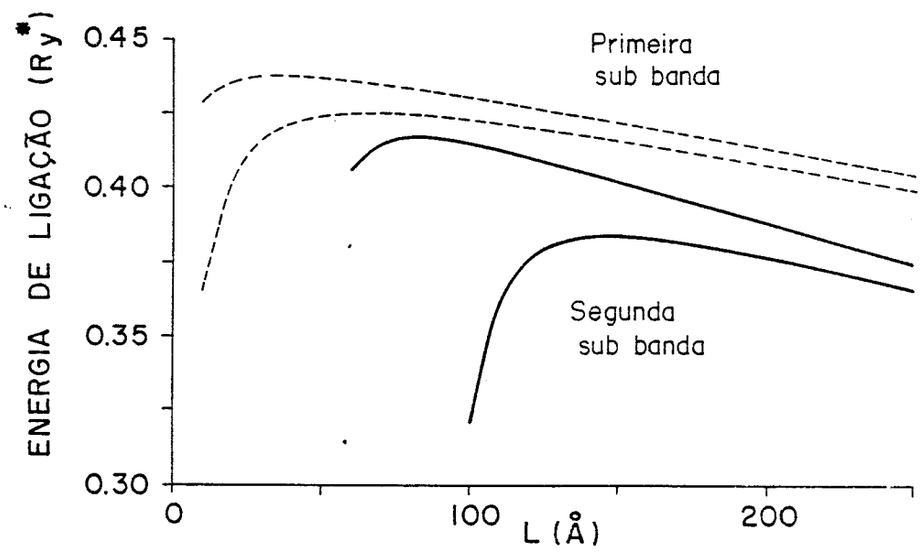

Figura 8b - Energias do estado 2P±. As curvas superiores para cada subbanda são obtidas com x = 0,3 e as inferiores com x = 0,1.

Também notamos que os estados 2p± (principalmente na primeira subbanda) são menos sensíveis à largura do poço que os estados 1s; e que quanto maior x, maior a energia de ligação devido ao confinamento mais pronunciado dos elétrons dentro do poço (equivalente ao estreitamento do poço).

Para analisarmos o efeito da largura do poço para sistemas com densidades eletrônicas não nulas, mostramos na figura 9 a energia de ligação (tipo 1s) versus Ns para um poço de x = 0.3 e L = 100Å (mesmo da figura 4) e também L = 200Å . Vemos que para valores de Ns baixos estas energias estão próximas daquelas inferidas da figura 8a para estes estados. Quando a densidade

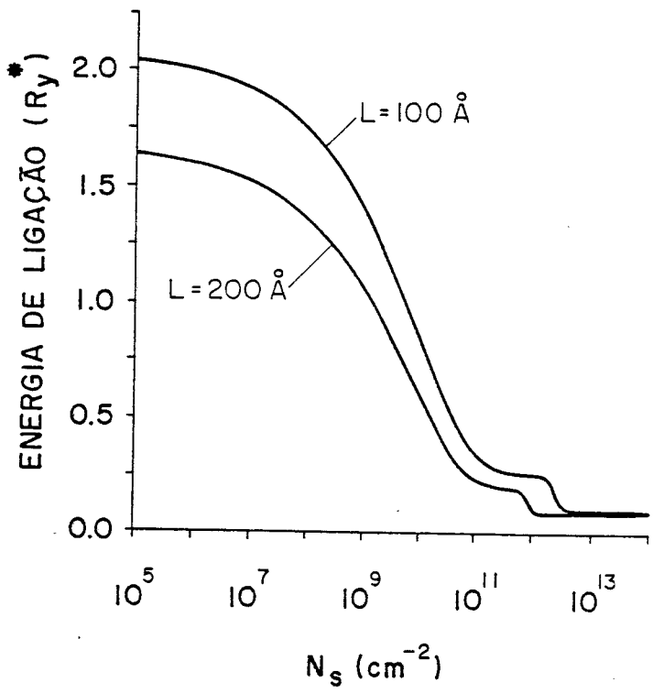

Figura 9 - Energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda (x = 0,3)

aumenta, a blindagem eletrônica do potencial da impureza se apresenta em uma forma mais eficiente para o poço estreito, tanto no preenchimento da primeira subbanda quanto no da segunda; o que pode ser notado pela diminuição mais acentuada da energia de ligação do poço L = 100Å com o aumento de Ns. Isto parece ser intuitivo, pois no poço estreito os elétrons estão mais próximos à impureza, podendo blinda-la mais eficazmente.

CAPÍTULO - 3

Dependência da energia de ligação com a posição da impureza dentro do poço quântico.

Neste capítulo analisamos a energia de ligação como função da posição da impureza no poço. Fazemos isto para estados ligados do tipo 1s e 2p± tanto da primeira quanto da segunda subbanda, sendo também o efeito de blindagem eletrônica considerado. Por fim introduzimos o conceito de densidade de estados associada à posição da impureza e a calculamos para o caso específico que está relacionado como transições inter e inta-subbandas, alvo de recentes medidas experimentais.

3.a - Energia dos estados ligados da primeira subbanda em função da posição da impureza.

Variando a posição da impureza dentro do poço ($z_o < L/2$) obtemos as energias de ligação plotadas na figura 10 para estados do tipo 1s da primeira subbanda de um poço de L = 200Å e x = 0.3 . Nesta figura mostramos como a energia deste estado varia com a posição da impureza para três diferentes densidades eletrônicas, Ns= $10^{7}, 10^{11}, 10^{12} cm^{-2}$. Nosos resultados, para estas densidades,

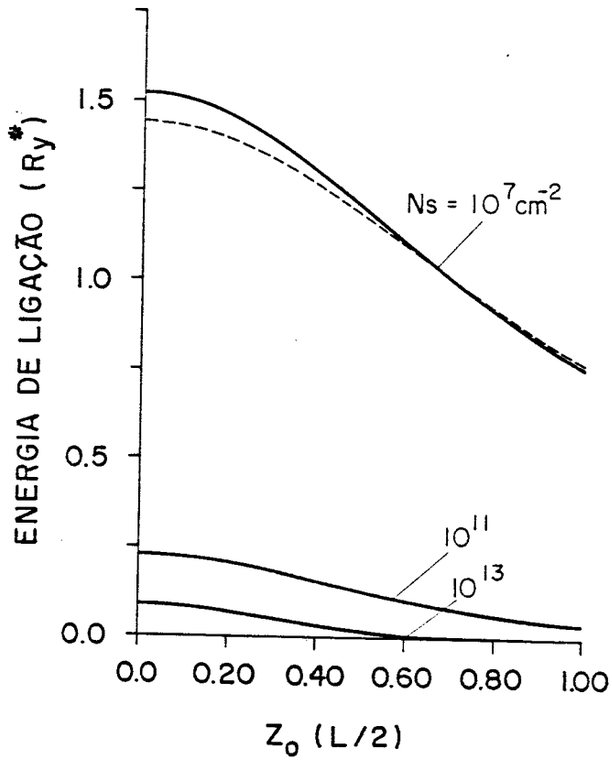

Figura 10 - Energia do estados 1s da primeira subbanda como função da posição da impureza (L = 200 Å , x = 0,3; em tracejado : x = 0,1).

segue basicamente o mesmo comportamento já observado[2] em poços de barreiras de potencial infinitas e Ns = 0, ou seja, maior energia de ligação para a impureza no centro do poço, decrescendo à medida que a impureza é deslocada para perto da interface GaAs-GaAlAs. Este fato é entendido como decorrência da distribuição eletrônica do estado ligado, que, como mostra a eq.(5a), é do tipo cossenoidal na direção z, exibindo um máximo no centro do poço e um valor menor (diferente de zero[3]) na interface, implicando em

um comportamento semelhante para a energia de ligação.

Para a curva com Ns = $10^{13}cm^{-2}$ observamos que a energia de ligação quase se aula quando a impureza está próxima à barreira de potencial. Devemos salientar que para esta densidade o efeito do preenchimento eletrônico da segunda subbanda na blindagem já se fez notar, atingindo a segunda saturação observada anteriormente na figura 5.

Ainda na figura 10, vemos para Ns = $10^{7}cm^{-2}$ uma curva em tracejado para L = 200Å, mas com x = 0,1. Notamos que a energia de ligação neste caso é menor que aquela para x = 0,3 com a impureza no centro do poço, mas se torna ligeiramente superior com a impureza na interface. Este fato é facilmente compreendido, pois aumentando as barreiras do potencial aumentamos também a distribuição eletrônica no centro do poço e a diminuímos na interface, levando a energia de ligação à um comportamento similar ao desta distribuição.

Os resultados para o estado ligado do tipo 2p± da primeira subbanda como função da posição da impureza estão plotados na figura 11, onde mostramos três curvas referentes às densidades N_s= 10^{3}, 10^{5} e $10^{7}cm^{-2}$; lembrando que para este estado a seguda subbanda não chega a ser ocupada, pois ele deixa de

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

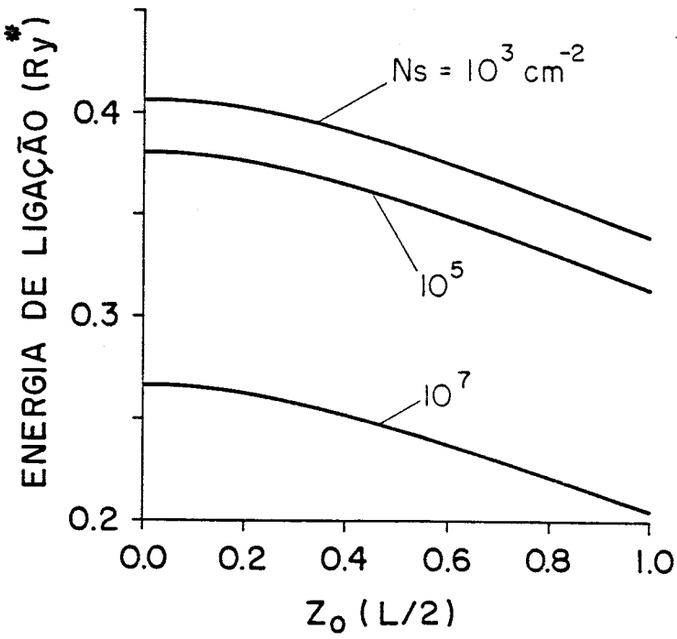

Figura 11 Energia do estados 2p± da primeira subbanda como função da posição da impureza (L = 200 Å, x = 0,3).

existir a uma densidade eletrônica inferior à ocupação de tal subbanda. Pela figura 11 notamos que o comportamento da energia de ligação com a posição da impureza é basicamente o mesmo observado para o estado 1s, ou seja, maior energia de ligação para a impureza no centro do poço do que com esta na interface. No entanto, esta dependência da energia de ligação com a posição da impureza é mais discreta que aquela observada para o estado 1s, haja visto que esta energia pouco varia (≈ 0,05Ry^*) quando trazemos a impureza do centro para a interface do poço. Ainda, notamos que esta variação quase que independe da densidade Ns,pois

as três curvas da figura 11 praticamente diferem por um fator constante.

3.b - Energia de ligação dos estados ligados da segunda subbanda em função da posição da impureza.

Como feita para a primeira subbanda, calculamos as energias de ligação para estados do tipo 1s e 2p± pertencentes à segunda subbanda com a impureza deslocada do centro do poço. Na figura 12 observamos as energias do estado 1s da segunda subbanda em função da posição da impureza em um poço de L = 200Å e x = 0,3 com Ns = 10^{7},10^{11}e $10^{13}cm^{-2}$. Notamos nesta figura um comportamento completamente distinto daquele exibido por este mesmo tipo de estado na primeira subbanda (fig.10). Vemos aqui que a energia de ligação atinge um máximo em uma posição intermediária entre o centro e a interface do poço, e não mais na posição central como antes observado. Isto pode ser facilmente interpletado se lembrarmos a forma senoidal da distribuição eletrônica da segunda subbanda (eq.(5b)), que não mais é máxima no centro do poço, mas sim em uma posição deslocada para a interface; o que também torna máxima a energia de ligação nesta região.

Com respeito à dependência na densidade eletrônica Ns, podemos notar que para baixos valores de Ns (isto é $10^{7}cm^{-2}$) a energia de ligação é maior no centro do que na interface do poço.

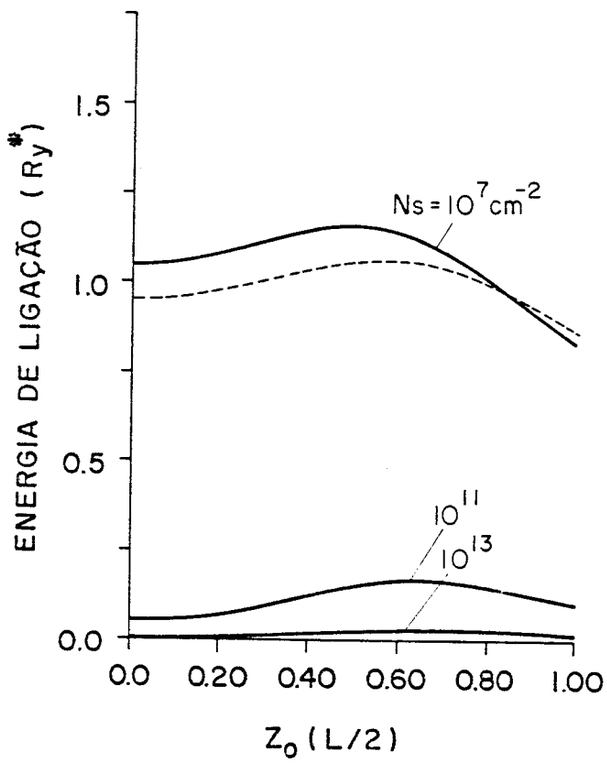

Figura 12 - Energia do estados 1s da segunda subbanda como função da posição da impureza (L = 200 Å, x = 0,3; em tracejado :x =0,1)

Isto não acontece quando Ns é da ordem de 10^{11} ou $10^{13} cm^{-2}$, indicando que a blindagem eletrônica é mais efetiva quando a impureza está no centro do poço; o que parece ser intuitivo, pois quando a impureza está nesta posição há uma maior nuvem eletrônica ao seu redor do que quando a impureza está na interface, onde parte significativa da distribuição eletrônica pode distar L da impureza. Ainda na figura 12, para a curva na qual o efeito da blindagem eletrônica já se saturou pelo preenchimento pelos

elétrons livres da segunda subbanda, isto é Ns = $10^{13}cm^{-2}$, vemos que a energia de ligação que era quase nula para a impureza na posição central, acaba por ter um acréscimo (ainda que pequeno) quando a impureza se desloca em direção à barreira de potencial; efeito contrário àquele observado nestas mesmas condições para o estado 1s da primeira subbanda (fig.10).

Também nesta figura 12 podemos observar o efeito da altura da barreira do potencial na energia de ligação. Vemos em tracejado a energia do estado 1s da segunda subbanda com Ns = $10^{7}cm^{-2}$, L = 200Å e agora x = 0,1. Ressaltamos duas observações : uma, como na primeira subbanda, que a energia de ligação torna-se maior, para x = 0,3, em relação à x = 0,1 , quando temos a impureza no poço; e outra, que o ponto de máximo para x = 0,1 é deslocado mais para a interface. Novamente, a explicação para estes fatos está no maior confinamento da função de onda eletrônica em torno de z = 0 para x (ou V_o) mais elevados.

Para o estado ligado do tipo 2p± da segunda subbanda obtemos como resultados a figura 13, que nos mostra a energia de ligação deste estado em função da posição da impureza, com Ns= 10^{3}, 10^{5}e $10^{7}cm^{-2}$; sendo considerado o mesmo poço das figuras anteriores. Notamos nesta figura que o comportamento é muito similar àquele exibido pelo estado 2p± da primeira subbanda. Com um pouco mais de atenção podemos observar que a variação da energia com a posição da impureza é ainda mais discreta, indicando

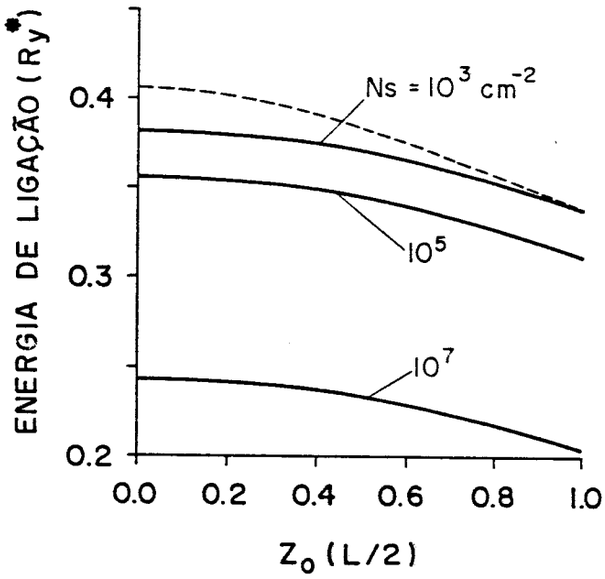

Figura 13 - Energia do estados 2p± da segundaa subbanda como função da posição da impureza (L = 200 Å, x = 0,3). Em tracejado a energia deste mesmo tipo de estado da primeira (Ns = $10^3 cm^{-2}$).

sua pouca dependência com este parâmetro. Também notamos que o comportamento exibido pelo estado 1s desta segunda subbanda não aparece claramente aqui, ou seja, não observamos um máximo na energia para valores de z_0 deslocados para a interface. No entanto, em relação ao estado 2p± da primeira subbanda, as curvas desta figura 13 mostram uma tendência em aumentar as energias de ligação para as posições da impureza próximas à interface, como é facilmente visto nesta figura pela curva em tracejado que representa o estado 2p± da primeira subbanda com Ns = $10^3 cm^{-2}$.

3.c - Comparação entre nossos resultados e aqueles obtidos experimentalmente em medida de transições inter-subbandas.

Como já dito na introdução deste trabalho, as energias dos estados ligados podem ser inferidas de medidas nas quais se observam transições óticas em estruturas MQW. Deste modo, nunca analisamos um único nível energético, mas um par de níveis ressonantes. Experimentos de FIR investigam transições intra-subbandas 1s-2p± na presença de campo magnético, sendo por isto analisada em separado no próximo capítulo. Já as medidas RRS podem ser confrontadas com transições inter-subbandas obtidas em nosso modelo teórico, o que fazemos adiante.

Não devemos esquecer que nossas funções variacionais ligadas não "prendem" o elétron na direção z, sendo nesta direção tomada a solução exata do poço quântico. Assim, mesmo para $z_0 = 0$, há uma paridade definida para nossos estados ligados, o que impossibilita transições entre estados da primeira subbanda (par) para a segunda subbanda (ímpar). Contudo, no caso mais realístico de medidas experimentais a inversão de paridade em uma transição inter-subbanda deixa de existir se a impureza estiver deslocada do centro do poço; sendo, portanto, tal transição possível[20]. Neste

intuito, analisamos tais transições para diferentes posições da impureza no poço.

Para uma largura L do poço e a concentração x de Al determina-se os níveis de energia das subbandas, e com isto o "splitting" entre elas. Como já observamos anteriormente, nossos resultados para estes valores não são precisos se o poço quântico contiver impurezas e elétrons em excesso, já que isto acarreta o entortamento das bandas que não é tratado aqui. Tendo isto em consideração, podemos analisar as diferenças entre as energias dos estados ligados 1s da primeira e segunda subbanda, e caso necessitemos das energias de transição entre estes estados, adicionamos o "splitting" entre estas subbandas. Deste modo, pela figura 14 vemos esta diferença apresentada para um poço de L =200Å e x = 0,3 , que nada mais representa do que a diferença entre os resultados mostrados nas figuras 10 e 12. Notamos que a impureza no centro do poço sempre apresenta uma energia de ligação maior na primeira subbanda que na segunda subbanda, sendo a diferença mostrada sempre positiva em $z_0 = 0$. Porém, se a impureza for deslocada suficientemente para perto da interface a situação se inverte, com valores negativos para a diferença $E_1^{1S} - E_2^{1S}$. Este fato novamente tem como explicação a forma cossenoidal e senoidal das funções $\xi(z)$ do poço. Deixando de lado o caso em que a segunda subbanda está ocupada, Ns $=10^{13} cm^{-2}$, vemos que as outras duas curvas da figura 14 chegam a atingir um máximo negativo de aproximadamente $-0,1R_y^*$ ($\approx -0,5$ meV), sendo este máximo obtido

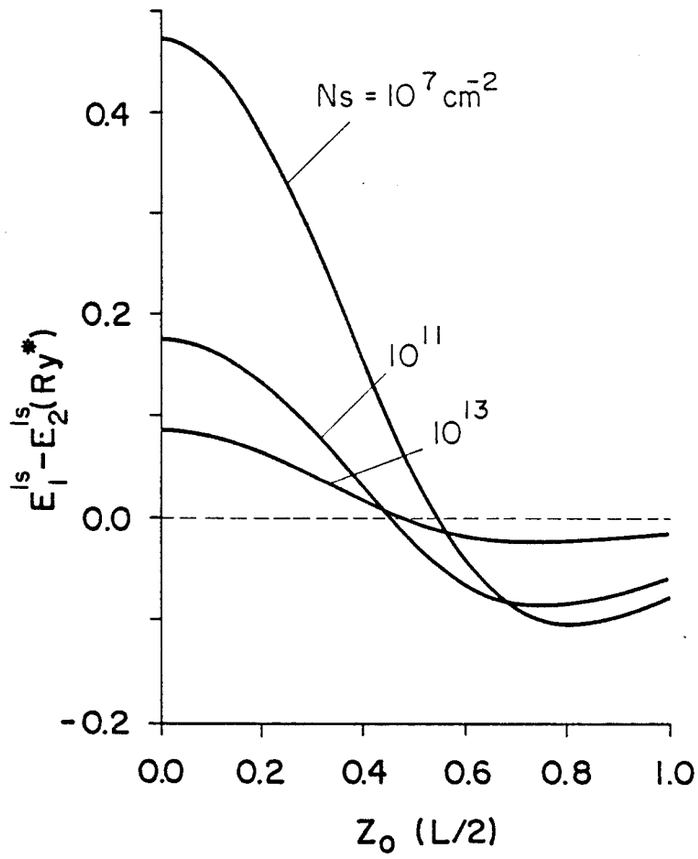

Figura 14 - Diferença das energias dos estados 1s da primeira e segunda subbanda como função da posição da impureza (L = 200 Å , x = 0,3)

para z_0 menores na curva de maior Ns. Este último comportamento também é verdade no que diz respeito a inversão de sinal da diferença de energia, ou seja, para Ns maiores necessitamos de z_0 menores para termos uma diferença negativa.

Podemos neste ponto tomar os resultados expe
Perry et al[20] para serem confrontados com os no
experimento foram obtidos resultados de medidas d
inter-subbandas em um poço com L = 238Å e x = 0,23
impureza (silício, no caso) se localizava em uma fa
de um terço da largura do poço. Em condições experim
inferido que Ns = 0. Nesta medida foi obervado um
espectro de absorção, onde o pico menos energético (2
foi reconhecido como devido à transição de elétr
("splitting") e o mais energético (24,0 meV) a
transição entre estados ligados da primeira e segunda
Para este mesmo poço, com z_o = 0, nossos cálculos dão 2
23,46 meV respectivamente. Vemos assim que os resultado
estão um pouco abaixo (≈ < 5%) dos experimenta
provavelmente pelas simplificações do modelo
principalmente a consideração de bandas achatadas, que
absolutamente ocorrer devido à presença de impurezas n
pesquisada. Ainda assim, podemos minimizar tais dificu
analisarmos apenas as posições relativas dos picos no c
espectro de absorção de transições inter-subbandas. Ne
nossa transição entre estados ligados está 2,45 meV à
transição entre subbandas; valor este um pouco acima dos
encontrados experimentalmente. Porém, devemos lembra
impurezas na amostra não estão todas em z_o= 0 , mas vari
intervalo de L/3 centrado sobre este valor. Assim,

nossa impureza para z_o= 15Å chegamos ao valor de 2,2 meV observado (o comportamento da diferença de energia com z_o neste poço à Ns = 0 é bem similar àquele com Ns = $10^7 cm^{-2}$ mostrado na figura 13).

Medidas RRS mais recentes mostram algo diferente. Gammom e seus colaboradores[15] também observaram um dubleto em seu espectro de absorção para um poço de L = 205Å e x = 0.25, mas agora as posições dos picos aparecem em ordem inversa, isto é, o pico menos energético (25,5 meV) é devido a transição entre estados ligados e o pico mais energético (27,9 meV) diz respeito à transições entre subbandas pelos elétrons livres Tudo isto com Ns = $1,5.10^{11} cm^{-2}$ e com a impureza novamente localizada na terça parte central do poço. Nossos resultados, para este mesmo poço, fornece um valor para o "splitting" das subbandas um pouco menor (27,28 meV) que o observado. De novo podemos atrubuir tal diferença ao entortamento das bandas de condução dos materiais da amostra, já que temos agora impurezas dentro do poço (que aumenta o "splitting" , como na medida de Perry) e também elétrons no poço e impurezas na barreira que diminuem o "splitting" , deixando a diferença em torno de $\cong$ 3% . Para o pico relativo à transição entre estados ligados obtemos uma energia de 28,34 meV para a impureza no centro do poço. Como podemos ver nossos resultados não confirmam a inversão dos picos no dubleto, sendo ainda a diferença de energia dos estados ligados tipo 1s das duas primeiras subbandas igual à 1,06 meV positivos. A inversão poderia ocorrer

se esta diferença fosse negativa. Para esta análise plotamos na figura 15 os resultados das energias dos estados 1s das duas primeiras subbandas, bem como a diferença entre elas, em função de z_o para o poço em questão (L = 205Å, x = 0,25 e Ns= $1,5.10^{11}cm^{-2}$). Notamos que obtemos valores negativos para a diferença de energia (portanto E_1^{1s} menor que E_2^{1s}) para z_o maiores que ≈ 46Å , sendo o valor negativo máximo (≅ -0,42 meV) atingido para z_o≅ 78Å .

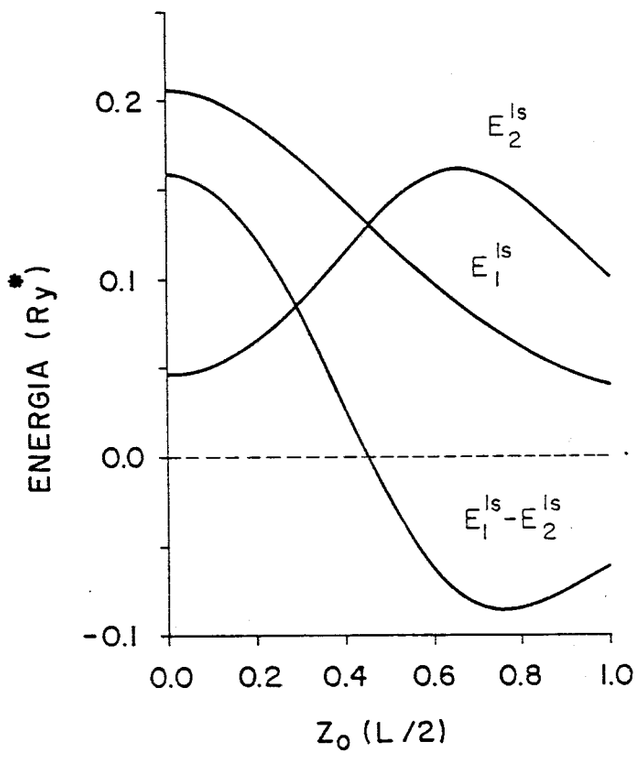

Figura 15 = Diferença de energia dos estados 1s da primeira e segunda subbanda, e seu diferença, como função da posição da impureza (L = 205 Å, x = 0,25 e Ns = $1,5.10^{11}cm^{-2}$).

Acabamos por chegar em duas dificuldades na explicação da inversão dos picos no dubleto observado por Gammom. Podemos explicar esta inversão se acreditamos que a impureza não está no centro no poço, levando a uma energia de ligação maior na segunda subbanda do que na primeira. No entanto, temos que desloca-la cerca de 80Å na direção da interface (≅ 20Å próximo a esta), sendo que o máximo esperado para este deslocamento é metade de L/3, ou seja ≅ 34Å . Esta dificuldade pode ser amenizada pelos recentes estudos[13,14] que indicam que a impureza (Si) "demora" um certo tempo para ser incorporada à estrutura MQW crescida, deslocando-se assim na direção de crescimento da amostra, o que nos possibilita aumentarmos o nosso valor limite além dos 34Å . Outra dificuldade reside no valor da inversão dos picos (-2,4 meV experimentalmente contra -0,42 meV em nossos resultados), mostrando que a energia do estado ligado da segunda subbanda é maior que da primeira 5 vezes mais que o esperado por nós. Podemos diminuir este fator se considerarmos a não-parabolicidade, contudo, como já dissemos em ocasiões anteriores, a inclusão deste efeito para Ns ≠ 0 é algo delicada pois o entortamento das bandas começa a afetar os níveis de energias envolvidos no problema.

Ainda mais, Gammom e seus colaboradores observaram que fazendo Ns ir à metade do valor inicial, ou seja $0,75.10^{11} cm^{-2}$, os picos do dubleto se sobrepunham. Nossos resultados indicam que, tomando z_0 convenientemente fixo, podemos ter o caso de $E_1^{1S}-E_2^{1S}$ negativo e através da diminuição de Ns tornar tal diferença

positiva ou nula. Porém esta diminuição de Ns deve ser bem mais significativa do que um fator 1/2 observado experimentalmente, e mesmo assim ficamos com a dificuldade anterior de obtemos o valor exato da inversão da diferença de energia.

3.d - Densidade de estados de impureza.

Como mostramos nas seções anteriores, variando a posição da impureza no poço varremos todo um intervalo de energia de ligação de um estado ligado. Seguindo a idéia inicial de Bastard[3] podemos calcular uma densidade de estados que nos fornece o número de posições possíveis da impureza (equivalente à "estados") que apresentam uma energia de ligação em torno de um determinado valor; o que definimos com :

$$g(E) = 2/L \left| \frac{dz_o}{dE} \right| \qquad (41)$$

onde z_o é a posição da impureza ($0 \leq z_o \leq L/2$) e $E(L,z_o)$ é a energia de ligação para o estado ligado sob consideração.

A partir de agora analisamos a dependência desta densidade de estados com respeito à densidade Ns de elétrons livres presentes no sistema. Na figura 10 havíamos visto três

curvas $E_i^{is}(z_o)$, uma para cada valor de Ns. Tomando a derivada em relação à z_o destas curvas e invertendo-as, calculamos por (41) a densidades de estados $g(E_i^{is})$ mostrada na figura 16. Nas ordenadas destas figuras temos as energias de ligação E_i^{is} e em suas absissas $g(E_i^{is})$ em unidades atômicas (a_o^* e $R\dot{y}^*$). Estas três curvas mostram um comportamento semelhante, ou seja, divergem a infinito para um valor superior E_i^{is}, atingem um mínimo para valores intermediários da energia e voltam a crescer (não mais divergem) para um valor inferior de E_i^{is}. Tal comportamento básico é o mesmo mostrado por Bastard em estados ligados em poços quânticos de barreiras de potencial infinitas. Notamos ainda que os valores de $g(E_i^{is})$ são cada vez maiores para Ns crescentes, o que pode ser facilmente compreendido pelo pequeno intervalo de energia de ligação que as curvas $E_i^{is}(z_o)$ varrem para Ns grandes, assim, como $\int_{E_{min}}^{E_{max}} g(E)\, dE$ deve ser normalizado, $E_{max}-E_{min}$ pequenos implicam em g(E) maiores, como o observado.

Os valores máximos de g(E) indicam que existem maiores números de estados para determinadas energias, o que ocorre para E_i^{is} máximo e mínimo em cada curva da figura 16, correspondendo respectivamente à posição da impureza no centro e na interface do poço. Logo, se analisamos um poço quântico com dopagem uniforme em todo o poço, esperamos que a energia média E_i^{is} seja mais fortemente determinada pela impureza nestas duas posições onde g(E) é máximo.

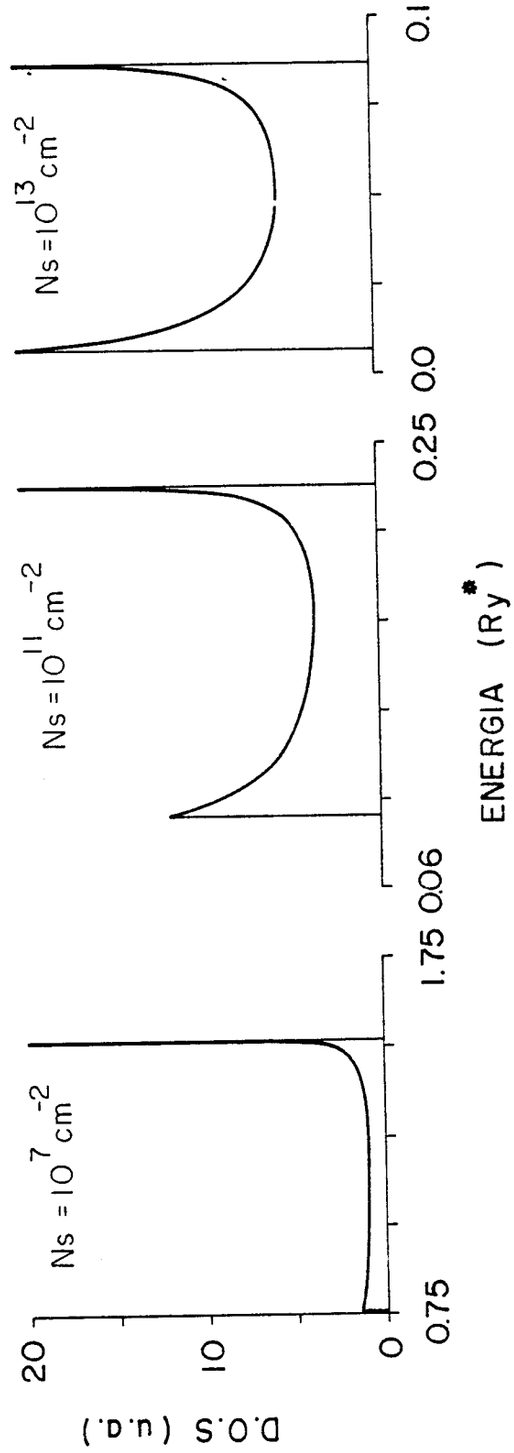

Figura 16 - Densidade de estados $g(E_1^{1s})$ ($L = 200\mathring{A}$, $x = 0.3$)

Frequentemente densidades de estados são utilzadas para

o cálculo da forma do espectro de absorção[13] entre estados ligados ressonantes. Neste caso devemos estudar $g(E_i-E_j)$ ao invés de apenas $g(E_i^{1s})$; onde E_i e E_j são as energias dos estados ressonantes. Assim, dos resultados das figuras 10 e 11 podemos inferir a respeito de transições 1s-2p± da primeira subbanda (a campo magnético nulo !) através do cálculo de $g(E_i^{1s}-E_i^{2p\pm})$. Na figura 17 mostramos $g(E_i^{1s}-E_i^{2p\pm})$ para Ns = $10^7 cm^{-2}$ (lembrando que o estado 2p± deixa de existir para Ns $>10^9 cm^{-2}$). Notamos nesta figura um gráfico bem similar àquele mostrado na figura 16 para $g(E_i^{1s})$, o que certamente é decorrente da pouca dependência do estado 2p± com z_0. Observamos ,então, apenas um deslocamento para mais baixas energias. Isto deixa inalteradas as conclusões já feitas para a densidade $g(E_i^{1s})$, onde os estados mais relevantes são aqueles com a impureza no centro e na interface do poço.

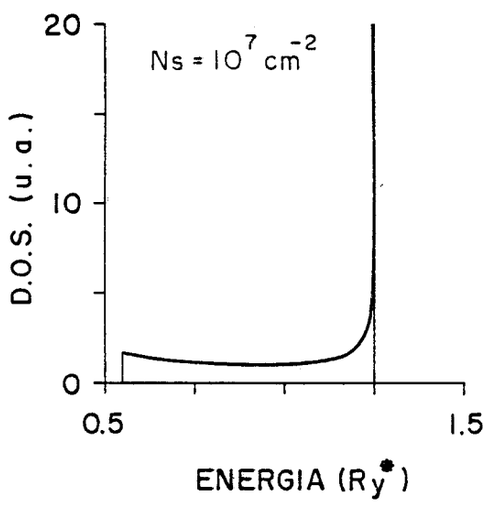

Figura 17 - Densidade de estados $g(E_i^{1s}-E_i^{2p\pm})$ para um poço com L = 200 Å e x = 0,3 .

Já para estados ressonantes de diferentes subbandas as

conclusões se alteram. Da figura 14 podemos inferir a respeito de transições inter-subbandas entre estados ligados do tipo 1s, calculando para isto $g(E_1^{1S}-E_2^{1S})$. Mostramos este resultado na figura 18 para a mesmas três densidades da figura 14. Com respeito à observação de que g(E) é maior para grandes valores de Ns vale a mesma argumentação exposta para $g(E_1^{1S})$, ou seja, Ns maiores fornecem $E_{max}-E_{min}$ menores, implicando em densidades de estados maiores para manter a normalização sobre todo intervalo de energia. Agora, notamos um comportamento distinto. Duas divergências são observadas, uma para $(E_1^{1S}-E_2^{1S})$ mínimo e outra para $(E_1^{1S}-E_2^{1S})$ máximo, correspondendo à posição da impureza no centro do poço (máximo) e à uma posição intermediária entre o centro e a interface do poço (mínimo), justamente onde $E_1^{1S}-E_2^{1S}$ assume o seu mínimo valor (fig.14). Assim sendo, as posições das impurezas que mais devem influir em um cálculo com $g(E_1^{1S}-E_2^{1S})$ são estas duas posições já citadas; diferente daquelas obtidas em estudos de transições intra-subbandas.

Ainda mais, notamos uma descontinuidade perto de $E_1^{1S}-E_2^{1S}$ mínimo, consequência da forma da curva $(E_1^{1S}-E_2^{1S})(z_0)$, fig.14, que apresenta para certos valores de energia dois valores correspondentes de z_0 distintos, que no cálculo de g(E) se somam. Logo, a energia na qual a descontinuidade ocorre é aquela em que a impureza está na interface do poço.

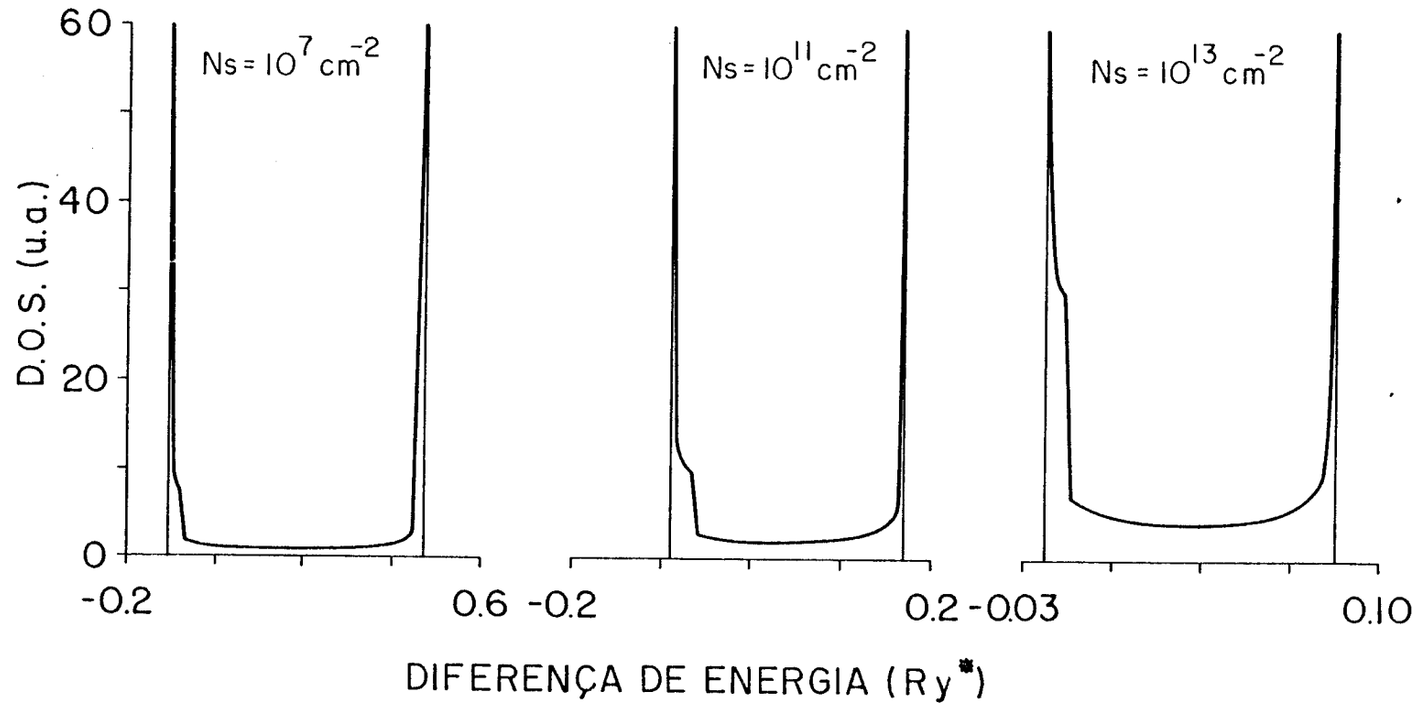

Figura 18 - Densidade de estados $g(E_1^{1s}-E_1^{1s})$ ($L = 200\mathring{A}$, $x = 0.3$)

CAPÍTULO - 4

Impureza rasa doadora em um poço quântico na presença do campo magnético.

Como já mencionado em ocasiões anteriores, as medidas de transições óticas entre estados ligados da primeira subbanda (intra-subbanda) são feitas na presença de campo magnético aplicado sobre a amostra. Neste capítulo consideramos em nosso sistema a presença deste campo e, com isto, obter algum respaldo em recentes resultados experimentais de medidas FIR em transições intra-subbanda 1s-2p+.

4.a - Desenvolvimento teórico.

O campo magnético é aplicado na direção do crescimento da amostra, ou seja, direção z (esquema conhecido como "geometria de Faraday"). Nestas condições o hamiltoniano na ausência da impureza fica :

$$H = \frac{1}{2m_i}\left[\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right]^2 + V_B(z) \qquad (42)$$

onde V_B é o potencial de confinamento dos elétrons no poço, isto é, $V_B = V_0$ para $|z| > L/2$ e zero para $|z| \leq L/2$; $\vec{P}$ é o operador momentum eletrônico e $\vec{A}$ o potencial vetor definido como :

$$\vec{A} = 1/2 \; (\vec{B} \times \vec{r}) \qquad , \tag{43}$$

no caso do campo magnético $\vec{B}$ ser uniforme. Substituindo (43) em (42) e fazendo as operações necessárias com $\vec{B} = B \hat{z}$, obtemos :

$$H = H_0 + \gamma L_z + \gamma^2/4 \; \rho^2 \tag{44}$$

onde $\rho^2 = (x^2+y^2)/(a_0^*)^2$, $\gamma = e\hbar B/(2m_1 c \; Ry^*)$, L_z o momento angular na direção z $(=-i \; \partial/\partial\phi)$ e H_0 sendo o hamiltoniano do problema sem a presença do campo magnético (eqs.(1) e (4)). O operador H pode ser separável nas direções $\hat{z}$ e $\hat{\rho}$, dando como solução ao problema de auto-valor os níveis energéticos :

$$E_{i,n} = E_i + \gamma \; (1 + 2n) \qquad , \tag{45}$$

sendo E_i as energias das subbandas encontradas no capítulo 1 e n indicando a quantização, agora também, na direção xy (níveis de Landau, $n \in \mathbb{N}$). Para as auto-funções encontramos :

$$\psi_{i,n,k_y} = \xi_i(z) \; e^{ik_y y} \; \Phi_n(x) \tag{46}$$

onde $\xi_i(z)$ são dadas em (5), $\Phi_n(x)$ é a solução do oscilador harmônico deslocado de $x_o = k_y \hbar c/(eB)$ e $k_y = 2\pi\, p/l_y$ (com p = 0, -1, -2,...,-eBA/(hc); dando a degenerescência nos níveis de Landau). Definimos $A = l_x\, l_y$ como sendo a área da amostra no plano xy.

Com a inclusão da impureza o hamiltoniano fica sendo:

$$H = H_o + \gamma\, L_z + \gamma^2/4\, \rho^2 + V_I(z-z_o,\rho) \;, \qquad (47)$$

tornando o problema claramente não separável. Novamente, para obtermos as soluções de estados ligados, vamos utilizar o método variacional. Greene e Bajaj[10] resolveram este problema fazendo uso de uma função variacional composta de uma soma de gaussianas, similar ao caso tridimensional[26], obtendo excelentes resultados quando comparados aos experimentais. Nós optamos por uma resolução mais simples, usando as mesmas funções variacionais do tipo hidrogenóide para as quais resolvemos o problema de estados ligados a campo magnético nulo (eq. (12a) e (12b)). Com estas funções de onda obtemos, através do valor esperado de (47), as energias de ligação para estados ligados da primeira subbanda :

$$E^{1s}_{mag} = (E_1 + \gamma) - [E_1 + E^{1s}_1 + 3/2\, (\gamma/b_1)^2] \qquad (48a)$$

$$E^{2p+}_{mag} = (E_1 + \gamma) - [E_1 + E^{2p+}_1 + \gamma + 5\, (\gamma/b_2)^2] \qquad (48b)$$

sendo b_1 e b_2 os parâmetros variacionais e E_1^m (m = 1s ou 2p+) dado em (16). Notamos em (48) que o nível energético dos elétrons livres se encontra no primeiro nível de Landau (n = 0) $E_{1,1} = E_1 + \gamma$, não sendo mais contínuo, mas sim discreto e com degenerescência dada por k_y ; assim, energias de ligação positivas fazem sentido, indicando que o nível do estado ligado está acima do primeiro nível de Landau. Como veremos adiante, este é o caso do estado 2p+ para altos valores de B.

4.b - Dependência da energia de transição entre estados ligados 1s-2p+ da primeira subbanda com o campo magnético.

Nesta seção objetivamos justificar o uso das funções variacionais tipo hidrogenóides ao invés do cálculo mais complexo desenvolvido por Greene e Bajaj (GB). Na verdade, estamos interessados no efeito de blindagem eletrônica sobre as energias de transição 1s-2p+ , que recentemente foram alvo de medidas experimentais[15], e por isto nos sugeitamos a perder de um pouco de precisão em favor da simplicidade dos cálculos.

Minimizando as expressões (48) com respeito aos parâmetros variacionais obtemos as energias de ligação para os

estados 1s e 2p+ em função do campo magnético B (apenas lembramos que a energia do estado 2p- pode ser obtida da energia do estado 2p+ pela adição de 2γ). Com tal minimização obtemos as energias de transição intra-subbanda 1s-2p+ mostrada na figura 19 para um poço de largura L = 210Å e x = 0,3. Nesta figura apresentamos os resultados para a impureza no centro e na interface do poço, como também os resultados de medidas FIR feitas por Mercy e seus colaboradores[14] para impurezas na terça parte central do poço e na terça parte central da barreira de GaAlAs (a largura desta barreira foi determinada entre 125Å e 150Å). Ainda nesta figura exibimos os resultados teóricos de Greene e Bajaj que fazem uso de uma função variacional mais elaborada.

Vemos na figura 19 que os nossos resultados estão um pouco abaixo do calculado por GB. Esta diferença se mostra maior ($\cong$ 1meV) para campos magnéticos fracos, diminuindo à medida que o campo se torna mais intenso, até efetivamente haver o cruzamento das curvas. Devemos ressaltar que os resultados de GB foram obtidos com alguns parâmetros ligeiramente diferentes dos nossos, tais como o uso de 85% da diferença de gap entre o GaAs e o GaAlAs contra 60% usado por nós na obtensão de V_0; também fizeram uso do valor do $R\overset{*}{y}$ como 5,83meV ao invés dos 5,3meV que usamos. Estas

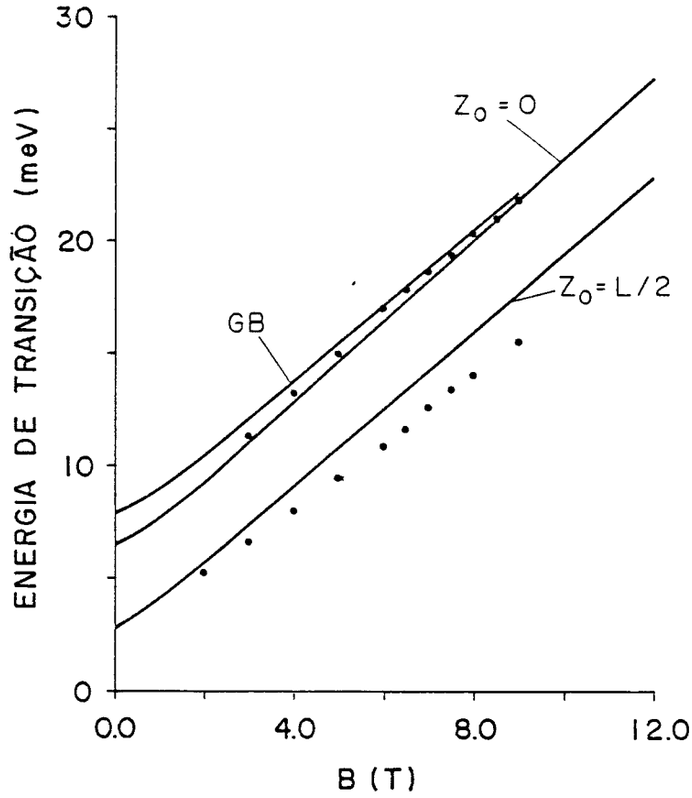

Figura 19 - Energias de transição 1s-2p+ (L = 210 Å, x = 0,3) para a impureza no centro do poço (z_0 = 0) e na interface (z_0= L/2). Também mostramos os resultados de Greene e Bajaj[10] (GB) e os dados experimentais de Mercy et al.[14].

diferenças no tratamento da estrutura do poço quântico causa a diminuição, ainda que pequena, das discrepâncias entre os resutados teóricos mostrados na figura 19, tornando a justificativa do uso de funções variacionais simples ainda mais

plausível. Mesmo com tais ajustes de parâmetros a curva GB continua acima da encontrada por nós.

Com respeito aos dados experimentais, vemos que nossos resultados fitam bem os pontos obtidos em medidas com a impureza em torno do centro do poço. Como já salientamos no capítulo anterior, as impurezas tendem a se deslocar para a interface na direção do crescimento da estrutura. Assim, esperaríamos que os pontos experimentais estivessem entre nossas curvas com $z_0 = 0$ e $z_0 = L/2$. Isto não ocorre, estando aqueles um pouco acima dos nossos resultados para a impureza no centro do poço. Neste sentido os resultados de GB são mais realistas que os nossos. Cabe ressaltar que as medidas experimentais mostram um alargamento nas linhas de absorção do espectro de transição 1s-2p+ no sentido de deslocar o pico de absorção em direção à curva $z_0 = L/2$, o que parece confirmar a tendência da impureza em se localizar mais para perto da parede do poço. Para a impureza na interface nossos resultados parecem coerentes, pois eles se encontram acima dos pontos experimentais que foram obtidos com a impureza dentro da barreira, devendo assim apresentar uma energia de transição menor, seguindo a mesma tendência observada quando vamos com a impureza de $z_0 = 0$ para $z_0 = L/2$ e agora além deste valor.

Com a introdução do campo magnético os níveis energéticos dos estados ligados sofrem uma elevação (principalmente o estado 2p+) em relação ao fundo da banda de condução do GaAs. Desta maneira o efeito da não-parabolicidade da

banda de condução neste material começa a se manifestar cada vez mais fortemente (quanto maior for a altura do nível energético), aumentando a energia de ligação dos estados em questão. Este efeito age no sentido de diminuir a inclinação das curvas (E_i^{1s}-E_i^{2p+}) versus B(T), tornando-as mais paralelas aos dados experimentais. Ainda, para altos campos magneticos (B >8T), o efeito da interação elétron-ligado-fonon começa a "entortar"[16,17,18] a curva da energia de transição, até torna-la paralela ao eixo B(T) (o que ocorre à ≈ 16,5 T); podendo, inclusive, ser esta a causa de encontrarmos o ponto experimental à B = 8,5T abaixo da inclinação determinada pelos pontos a menores campos magnéticos.

4.c - Dependência da energia de transição 1s-2p+ com a densidade eletrônica na presença de campo magnético.

Recentemente Gammon e seus colaboradores[15] observaram experimentalmente o efeito da blindagem eletrônica em medida FIR de transições intra-subbandas 1s-2p+. Como nos capítulos anteriores demos ênfase a este efeito de blindagem, fomos tentados a introduzir o campo magnético em nosso modelo visando a obtensão de resultados teóricos que confirmassem os dados experimentais.

Como visto na primeira seção deste capítulo, o campo magnético altera não somente o estado ligado, mas também o estado dos elétrons livres. Vimos que agora os elétrons não contistuem

mais um gás bidimensional com energias num contínuo, mas se quantizam na direção xy devido a presença do campo, criando os níveis de Landau. Logo, todo o tratamento dispensado na secão 1.c para a obtensão das funções dielétricas não pode mais ser utilizado quando temos o campo magnético no sistema. Para esta nova situação fazemos uso da função dielétrica calculada por Xiaoguang,Peeters e Devresse[29] no estudo da interação elétron-fonon sob o efeito de blindagem em hetero-estruturas com campo magnético aplicado. Adaptando esta função dielétrica ao nosso poço quântico, temos que :

$$\varepsilon(q)=1+2/qF_{iiii}(q)\left[4\pi Ns^{*}(Ry^{*}/\hbar\omega_{c})e^{-x}F_{oo}(x)\right] \qquad (49)$$

com $x = q^2(Ry^*/\hbar\,\omega_c)$, $F_{oo}(x) = \int_0^x (e^u - 1)/u\, du$ (calculado numericamente), $\omega_c = eB/(m_i c)$ e F_{iiii} sendo o fator de forma da primeira subbanda. Em (49) Ns^* é responsável pelo efeito de blindagem, sendo definido como $(Ns\, a_o^*)$. Devemos dizer aqui que a expressão (49) tem sua validade assegurada somente se o primeiro nível de Landau estiver ocupado, o que equivale a limitar o campo magnético a um certo valor mínimo para um dado Ns ($B_{min} = hcNs/2e$).

Como não nos interessa mais a ocupação das subbandas excitadas, tomamos o potencial efetivo como :

$$V(q) = V^{ext}(q) \;/\; \varepsilon(q) \qquad (50)$$

que introduzido em (48) nos dá as energias de ligação para os estados 1s e 2p+ como função da densidade eletrônica.

Como resultado podemos ver na figura 20 as energias dos estados ligados da primeira subbanda em função de Ns para um poço de larura L = 200Å e x = 0,3 a um campo magnético de intensidade 12 Tesla. Para este valor de campo podemos assegurar que somente o primeiro nível de Landau está ocupado se a densidade eletrônica for menor que $\approx 6.10^{11} cm^{-2}$; precisamente onde nossa curva deixa de existir. Para densidades maiores que esta, a função dielétrica necessita ser reescrita[29] para levar em consideração o efeito de blindagem dos elétrons do segundo nivel de Landau. Nesta figura 20 podemos ver um comportamento similar àquele exibido pelas energias de ligação na ausência de campo, ou seja, a energia de ligação se mantém constante para valores de Ns baixos, sofrendo o efeito de blindagem a partir de um valor mínimo desta densidade. Também observamos que este efeito é mais pronunciado no estado 1s que no estado 2p+, como visto antes no sistema sem campo magnético.

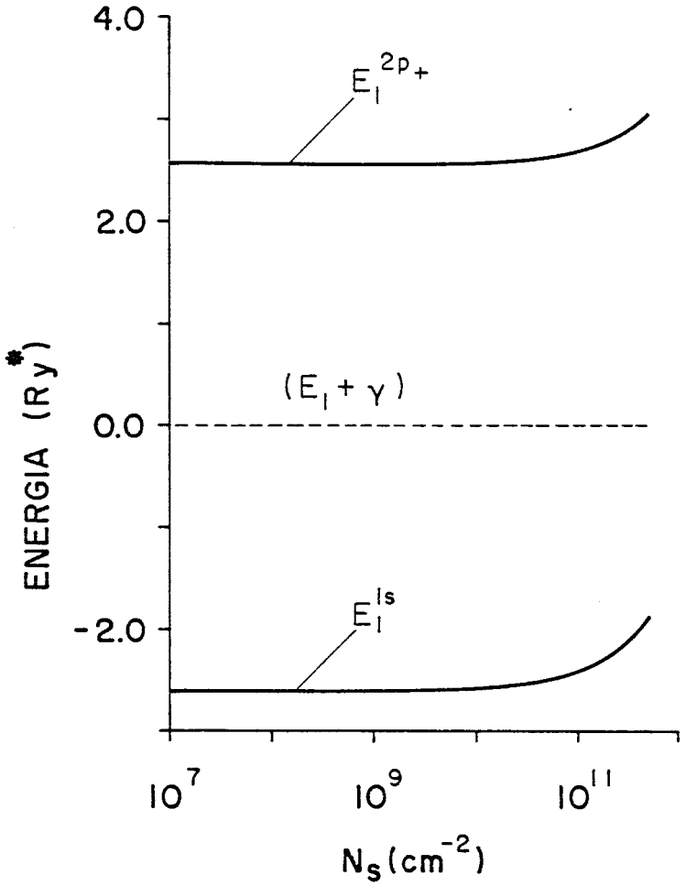

Figura 20 - Energia de ligação 1s e 2p+ (L = 200 Å e x = 0,3) com B = 12 Tesla. A linha em tracejado indica o primeira nível de Landau.

Como diferenças mais marcantes observadas com a introdução do campo magnético podemos apontar em primeiro lugar o fato que o efeito de blindagem, na presença do campo, retarda seu aparecimento ($Ns \simeq 10^{10} cm^{-2}$) em relação ao que acontece na ausência deste campo ($Ns \simeq 10^{7} cm^{-2}$, como visto na figura 3). Isto obviamente decorre dos novos estados em que se encontram os elétrons livres, responsáveis agora por uma função dielétrica (eq.(49)) totalmente distinta daquela anteriormente estudada (eq.(32)). Intuitivamente podemos compreender o ocorrido

imaginando que o campo magnético localiza os elétrons livres em certas regiões do plano em suas órbitas de Landau, deixando, às vezes, estes elétrons distantes da impureza,dificultando o efeito de blindagem e exigindo um número maior de elétrons para tornar este efeito apreciável. Isto pode ser facilmente visto na figura 21 onde plotamos a energia de transição 1s-2p+ como função do campo para diversas densidades Ns. Notamos que para baixos campos ($\approx$ 2 T) o efeito de blindagem já se manifesta apreciavelmente com Ns = $10^{10}cm^{-2}$, o que não ocorre a altos valores de B(T). Ainda nesta figura notamos que o limite de B indo a zero não nos leva aos resultados já encontrados nos capítulos anteriores, onde nem mesmo tinhamos o estado 2p+ a estas densidades. Este fato é justificado pela função dielétrica que estamos usando e que não atinge corretamente este limite[29].

Outra diferença marcante que pode ser constatada com a introdução do campo magnético é a não observação da saturação do efeito de blindagem com o aumento de densidade eletrônica, o que pode ser consequência da nossa restrição de ocuparmos apenas o primeiro nível de Landau (portanto limitamos Ns a um valor máximo para cada campo B). Poderíamos aumentar o campo magnético na esperança de observarmos este efeito de saturação, mas como podemos ver pela dependência de $\varepsilon(q)$ (eq.(49)) com Ns este efeito não deve ocorrer quando apenas um nível de Landau está ocupado, já que agora não temos mais o comportamento de $\Pi(q)F(q)$ dependentes de Ns como constatado na seção 2a (agora as dependências de ε com

q e Ns estão separadas).

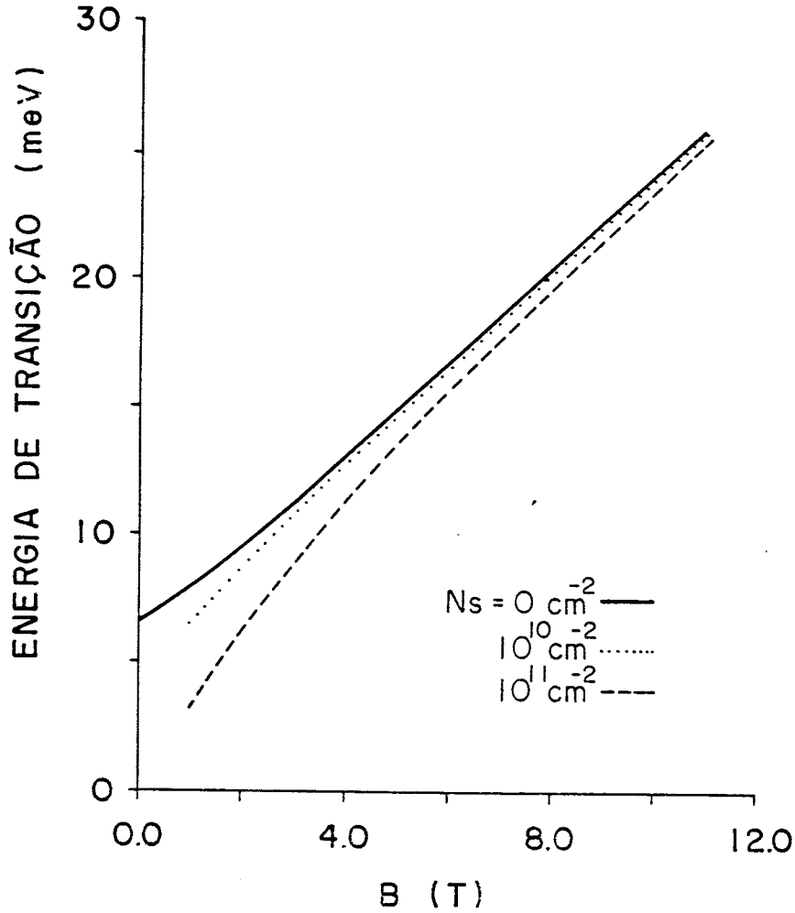

Figura 21 - Energia de transição 1s-2p+ (L = 200 Å, x = 0,3).

E ainda uma terceira diferença pode ser notada, a existência do estado 2p+ para altas densidades eletrônicas. Como já dissemos, agora os níveis energéticos dos elétrons livres são

discretos, e se o nível do estado ligado ultrapassar este nível ele ainda deve existir, pois não mais se localizará dentro do continuo de energia encontrado para o sistema a campo nulo. É exatamente isto que observamos na figura 20 para o estado 2p+, onde notamos que este nível ligado se encontra acima do primeiro nível de Landau (linha tracejada na figura 20). Se desejarmos observar o estado 2p- basta subtrairmos 2γ (ou neste caso $\simeq 3,8Ry^*$) do nível 2p+, e veremos que este estado ainda se encontra abaixo do nível dos elétrons livres.

Para a transição 1s-2p+ obtemos a figura 22 a partir dos resultados já exibidos na figura 20. Vemos que a energia de transição não sofre o efeito de blindagem para valores menores que $Ns \simeq 10^{10} cm^{-2}$, o que contrasta em muito com o caso do sistema à campo nulo, onde nesta densidade o efeito já era significativo, inclusive tornando o estado 2p+ inexistente. Esta indiferença da energia de transição com baixos valores da densidade Ns já foi por diversas vezes observada experimentalmente, onde podemos destacar o experimento de Mercy e seus colaboradores[14] que iluminando uma amostra de MQW (L = 210Å, x = 0,3) induziram uma densidade $Ns = 2.10^9 cm^{-2}$ e, com B = 7 T, e não observaram nenhum deslocamento do pico de absorção relativo àquele medido com a amostra no escuro (Ns = 0). Embora neste caso o campo magnético seja menor que o utilizado na figura 22, podemos observar na figura 21 que para esta densidade o efeito de blindagem na energia de transição é ainda muito pequeno para B = 7 T.

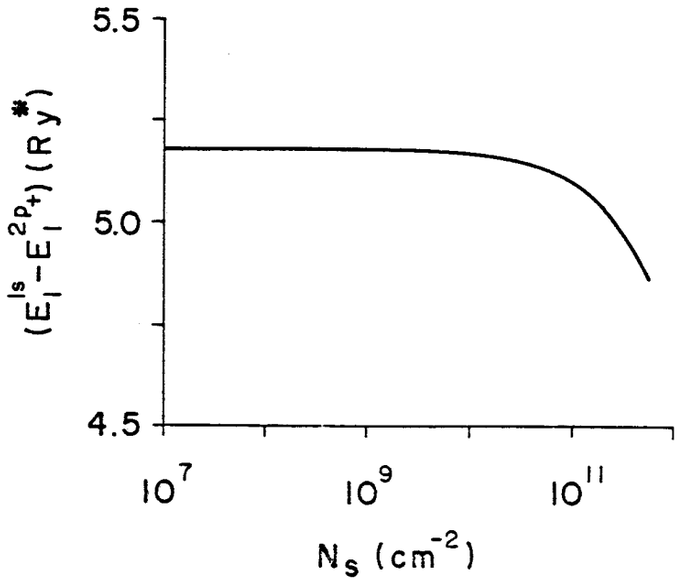

Figura 22 - Energia de transição 1s-2p+ (L = 200 Å, x = 0,3) com B = 12 Tesla.

A única medida experimental do efeito de blindagem eletrônica da impureza na energia de transição intra-subbanad 1s-2p+ foi realizada por Gammom e seus colaboradores[15], onde eles observaram que o pico de absorção em uma amostra de MQW com Ns = 0 e B = 12T se localizava no espectro à 26,7meV (L = 200Å, x = 0,3) . Já com outra amostra dopada com impurezas na barreira, o que elevou Ns à $1,5.10^{11}cm^{-2}$, eles notaram que este pico de absorção se encontrava em mais baixa energia, 25,0meV (L = 200Å, x = 0,25) ; uma diminuição de aproximadamente 6,36% . Naquela ocasião tal deslocamento no pico de absorção foi considerada pequena, pois somente se conhecia o resutado teórico[27] do comportamento da

energia de ligação do estado 1s da primeira subbanda (E_i^{1S}) como função de Ns, que nesta densidade varia apreciavelmente. Pela figura 22 para Ns = 0, obtemos uma energia de transição de 27,5meV, e a Ns = $1,5.10^{11}cm^{-2}$ esta energia cai para 26,7meV; portanto uma diminuição de aproximadamente 0,8 meV, ou 2,91% . Logo, chegamos a um pouco menos da metade da diferença observada experimentalmente, que passa a ser considerada agora grande em comporação com um resultado teórico. Nos valores dados acima para as energias de transição 1s-2p+ vemos que os resultados experimentais se encontram a mais baixas energias que os obtidos por nós. Podemos atribuir isto ao efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs nas energias de ligação, que, como dissemos, deve diminuir a inclinação de nossa curva ($E_i^{1S}-E_i^{2p+}$) versus B , efeito este não considerado aqui. Desta forma achamos por bem analisar apenas as diferenças observadas na energia de transição quando passamos Ns de zero para $1,5.10^{11}cm^{-2}$.

O fato das amostras usadas por Gammon serem diferentes para as duas densidades eletrônicas estudadas não chega a afetar significantemente os resultados, pelo menos os aqui obtidos, pois se passamos de x = 0,3 para x = 0,25 as alturas das barreiras de potencial diminuem, causando uma diminuição quase que igual nas energias de ligação dos estados 1s e 2p+, que fica assim imperceptível na energia de transição. Já no que diz respeito à dopagem com impureza dentro das barreiras de GaAlAs da amostra de maior densidade eletrônica, podemos esperar que efeito de muitos

corpos deva[21] ser reforçado, elevando o nível energético da primeira subbanda e tornando o efeito da não- parabolicidade mais acentuado. Como não tratamos estes efeitos em nossos cálculos, fica apenas a observação feita no parágrafo anterior sobre o efeito da não-parabolicidade nos resultados obtidos.

CAPÍTULO - 5

Conclusões

O trabalho que desenvolvemos enfoca o problema das energias dos estados eletrônicos ligados em hetero-estruturas semicondutoras que dão origem a potencias na forma de poços retangulares. O cálculo foi feito na aproximação de massa efetiva, onde consideramos o problema de um elétron ligado a uma impureza rasa doadora em um poço quântico. A blindagem eletrônica do potencial da impureza é considerada dentro do formalismo RPA, com o que pudemos obter as energias de ligação para estados ligados do tipo 1s e 2p± pertencentes às duas primeiras subbandas, fazendo, para isto, uso do método variacional.

No capítulo 1 descrevemos todo o desenvolvimento da parte teórica que utilizamos. Ficou claro que nossos resultados são confiáveis para poços quânticos não muito estreitos nem por demais largos ($0 < L < 300Å$). A razão para isto estava, primeiro, na dificuldade de se considerar o efeito da não-parabolicidade da banda de condução do GaAs de uma forma mais conveniente para $N_s \neq 0$, e também, na aproximação no uso de apenas m_1 em nossos cálculos, sendo deixado de lado a contribuição da massa m_2 na obtensão das energias de ligação ; fatores estes que se mostram importantes para poços estreitos. Já para poços muito largos, nossos resultados deixam de ser confiáveis devido à

simplificação que fizemos usando funções de onda variacionais desacopladas nas direções paralela e perpendicular ao crescimento da amostra.

No capítulo 2 começamos a expor nossos resultados dando ênfase na análise da dependência das energias de ligação com a densidade de elétrons livres Ns no poço. Vimos que o efeito de blindagem atua de forma marcante no sentido de diminuir as energias de ligação. Para os estados ligados 1s das duas primeiras subbandas vimos que o aumento de Ns nos levava à obtensão da saturação no efeito da blindagem por duas vezes; correspondendo ao preenchimento eletrônico destas duas subbandas. Para os estados $2p\pm$ observamos que a densidade eletrônica nem chegava a ocupar a segunda subbanda e este tipo de estado deixava de existir, tendo sua energia de ligação zerada.

No capítulo 3 analisamos a dependência da energia de ligação com a posição da impureza dentro do poço. Para os estados ligados pertencentes à primeira subbanda vimos que as energias de ligação decresciam monotonicamente quando íamos com a impureza do centro para a parede do poço. Já para os estados da segunda subbanda (principalmente o tipo 1s) o comportamento se mostrou diferente, havia um máximo na energia de ligação para uma posição intermediária da impureza entre o centro e a interface. Com a introdução do conceito de densidade de estados ficou claro que as transições intra-subbanda eram mais fortemente determinadas pelas impurezas localizadas no centro e na interface GaAs-GaAlAs do

poço. Não obstante, para transições inter-subbanda entre estados 1s das duas primeiras subbandas estas posições significativas da impureza eram o centro do poço e uma posição mais deslocada para a parede (não exatamente nela).

Analisando nossos resultados com vistas aos dados experimentais de transições inter-subbandas obtidas por medidas de RRS, conseguimos interpretar a inversão dos picos no espectro de absorção observado recentemente[15] como decorrente da localização descentralizada da impureza dentro do poço. Pudemos apenas justificar esta conclusão qualitativamente, pois nossos resultados, embora com boa concordância, não fitavam satisfatóriamente os dados obtidos em laboratório.

Também objetivando uma comparação entre nossos resultados e aqueles obtidos através de medidas FIR[15] para transições intra-subbanda 1s-2p+ no qual se mostrou presente o efeito da blindagem eletrônica, acabamos por introduzir o campo magnético em nosso modelo. Embora com um tratamento simples, utilizando as mesmas funções de onda variacionais do problema a campo nulo, pudemos fitar bem os dados experimentais à Ns = 0. Com isto pudemos fazer uso de uma função dielétrica calculada para sistemas quase-bidimensionais sob campo magnético e assim conseguimos inferir sobre o comportamento da energia de transição com respeito à densidade de elétrons livres presentes no poço. Vimos que quanto mais intenso era o campo magnético maior era a densidade eletrônica necessária para se observar o efeito de

blindagem. Em relação aos resutados experimentais obtivemos uma concordância qualitativa muito boa, faltando um certo refinamento em nosso cálculo, tal como a inclusão do efeito de muitos corpos e também a consideração do efeito da não-parabolicidade, para uma melhor interpretação teórica dos resultados medidos. Também aí perdemos em precisão pela escolha da nossa função variacional mais simples que aquela usada por GB e reconhecidamente boa para o tratamento do problema.

Referências.

1 - L.Ezaki and R.Tsu, IBM.J.Res.Dev. **14**, 61 (1970).

2 - P.M.Petroff , A.C. Gossard, R.A.Logan and W.W.Wiegmann, Appl.Phys.Lett. **41**, 635 (1982).

3 - G.Bastard, Phys.Rev.B **24**, 471 (1981).

4 - R.L.Greene and K.K.Bajaj, Solid State Commun. **45**, 825 (1983)

5 - C.Mailhiot, Y.C.Chang and T.C.McGill, Phys.Rev.B **26**, 4449 (1982).

6 - S.Chadhuri and K.K.Bajaj, Phys.Rev.B **29**, 1803 (1984).

7 - K.Jayakumar, S.Balasubramanian and M.Tomak, Phys.Rev.B **34**, 8794 (1986).

8 - R.A.Morrow and K.R.Bronstein, Phys.Rev.B **30**, 678 (1984).

9 - C.Priester, G.Bastard, G.Allan and M.Lannoo, Phys.Rev.B **30**, 6029 (1984).

10 - R.L.Greene and K.K.Bajaj, Phys.Rev.B **31**, 931 (1985).

11 - N.C. Jarosik, B.D. McCombe, B.V. Shanabrook, R.J. Wagner, J.Comas, J.Ralston and G.Wicks, Phys.Rev.Lett.**54**, 1283 (1983).

12 - J.M.Mercy, N.C.Jarosik, B.D.McCombe, J.Ralston and G.Wicks in "Proceeding of the 2nd International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices", Göteborg (1986).

13 - S. Huant, M. Grymberg, G.Martinez, B.Etiene, B.Lambert, A.Regreny, Solid State Commun. **65**, 1467 (1988).

14 - J.M. Mercy, Y.H.Chang,A.A.Reeder,G.Brozak and B.D.McCombe,

Superlattice and Microstructure **4**, 213 (1988).

15 - D.Gammon, E.Glaser, B.V.Shanabrook, D.Musser and M.Marietta in "Proceeding of the 7th Conference on the EP2DS", Santa Fe (1987).

16 - S.Huant, W.Knap, G. Martinez and B. Etiene, Europhys. lett., 7, 159 (1988).

17 - Y.H.Chang, B.D.McCombe, J.Mercy, A.A. Reeder, J. Ralston, and G.A. Wicks, Phys.Rev.Lett. **61**, 1408 (1988).

18 - F.Osório, M.Z.Maialle e O. Hipólito (comunicação privada).

19 - D.R.Cohn, D.M.Larsen and B.Lax, Phys.Rev.**B** **6**,1367 (1972).

20 - T.A. Perry, R. Merlin, B.V. Shanabrook and J. Comas, Phys.Rev.Lett. **54**, 2623 (1985).

21 - G.Fishman, Phys.Rev.**B** **27**, 7611 (1983).

22 - G.Bastard, E.E.Mendez, L.L.Chang and L.Ezaki, Phys.Rev.**B** **26**, 1974 (1982).

23 - E.D.Siggia and P.C.Kwok, Phys.Rev.**B** **2**, 1024 (1970).

24 - C.Kittel, "Quantum Theory of Solids"; John Wiley & Sons, inc.; New York, 1963.

25 - R.M.Kolbas, Ph.D dissertation, University of Illinois at Urbana - Champaign, 1979; nas referências de (6).

26 - C.Aldrich and R.L.Greene, Phys.Status Solidi **B** **93**, 343 (1979).

27 - J.A.Brum, G.Bastard and C.Guillemot, Phys.Rev.**B** **30**, 905 (1984).

28 - M.H.Degani, tese de doutorado (IFQSC - USP), 1988.

29 - Xiaoguang Wu, F.M.Peeters and J.T.Devresse (submetido para publicação).