

Universidade Federal de Minas Gerais
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Física

***Magneto-éxcitons em super-redes
semicondutoras de InGaAs/InAlAs***

Marcelo Valadares de Magalhães Pereira

Orientador: Prof. Paulo Sérgio Soares Guimarães
Co-orientador: Prof. Luiz Alberto Cury

Maio de 2004.

Marcelo Valadares de Magalhães Pereira

***Magneto-éxcitons em super-redes
semicondutoras de InGaAs/InAlAs***

*Orientador: Prof. Paulo Sérgio Soares Guimarães
Co-orientador: Prof. Luiz Alberto Cury*

*Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas
Gerais como requisito parcial para obtenção do grau de
MESTRE EM FÍSICA.*

Belo Horizonte, Maio de 2004.

À minha família e à Júlia.

Agradecimentos

- *Aos meus excelentes e engraçados orientadores, com quem aprendi muitas coisas e ri muito durante a elaboração deste trabalho;*
- *Ao Prof. Ivan F. L. Dias (UEL) e J. C. Harmand (CNRS, França), pela amostra estudada neste trabalho;*
- *Ao Prof. Flávio Plentz e ao Henrique (Camarada), pela grande ajuda na parte experimental;*
- *A todos os meus amigos da física, em especial Jujuba, Daniel, Letícia, Pará, Giselle, Lugão (Joãozinho), Indhira, Flávio (Disgrace) e Weber;*
- *Ao meu grande amigo Telão, pelas muitas “telãozices” e por sempre me lembrar da hora do almoço, mesmo sendo às 10:00 da manhã;*
- *À Tia Maria, pelos bons conselhos;*
- *Aos demais amigos;*
- *À CAPES, pela bolsa e pelo apoio à pós-graduação;*
- *Ao Instituto do Milênio de Nanociências (CNPq - PADCT), pelo apoio à pesquisa no laboratório;*
- *À FAPEMIG.*

Índice:

Abstract.....1

Resumo.....2

Capítulo 1: Introdução.....3

Capítulo 2: Aspectos Teóricos

2.1: Super-redes.....5

***2.2: Efeitos de campos magnéticos sobre os níveis de energia em
semicondutores.....9***

2.2.1: Cristal Volumétrico (bulk).....9

2.2.2: Estrutura com poços quânticos.....12

2.2.2.1: Campo paralelo à direção de crescimento.....12

2.2.2.2: Campo perpendicular à direção de crescimento.....13

2.3: Éxcitons.....15

2.3.1: <i>Éxcitons em cristais volumétricos (bulk)</i>	15
2.3.2: <i>Éxcitons em poços quânticos</i>	18
2.4: <i>Energia de ligação dos éxcitons em função do campo magnético</i>	19
 Capítulo 3: Técnica experimental e esquema de medida	
3.1: <i>Fotoluminescência</i>	21
3.2: <i>Montagem experimental</i>	24
 Capítulo 4: Medidas e resultados experimentais	
4.1: <i>As amostras</i>	30
4.2: <i>Identificação dos picos de emissão nos espectros de fotoluminescência</i>	32
4.3: <i>Medidas com o campo paralelo ao eixo z</i>	37
4.4: <i>Dimensionalidade, energia de ligação e massa dos éxcitons nas super-redes</i>	47
 Capítulo 5: Conclusões	 60

Apêndice:

Energias permitidas para poços quânticos com o campo magnético perpendicular à direção de crescimento.....62

Referências.....66

Abstract

In this work we study a sample with two undoped $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ superlattices grown in sequence on top of each other, on the same InP substrate. We performed magnetophotoluminescence measurements with magnetic fields up to 12 T for different temperatures from 4 K to 45 K. We obtain the exciton binding energy and the effective reduced mass for this structure and their variation with the temperature and the magnetic field.

Resumo

Neste trabalho estudamos uma amostra contendo duas super-redes não dopadas de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ crescidas em seqüência uma sobre a outra em um mesmo substrato de InP. Fizemos medidas de magnetofotoluminescência com campos magnéticos até 12 T para diferentes temperaturas de 4 K a 45 K. Obtivemos a energia de ligação dos éxcitons e as massas efetivas reduzidas para esta estrutura e sua variação com a temperatura e com o campo magnético.

Capítulo 1

Introdução

Heteroestruturas semicondutoras do tipo III-V são de grande importância no estudo de propriedades básicas de elétrons e buracos, além de ter grande potencial para uso em dispositivos opto-eletrônicos.

Nos últimos anos, estruturas de múltiplos poços quânticos e super-redes baseadas em $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ têm sido muito estudadas devido a seu grande potencial para aplicações tecnológicas. Como exemplos de aplicações para esse material, podemos citar a fabricação de dispositivos para Lasers de Cascata Quânticos (QCL's) para operação no infravermelho médio^[1.1 - 1.2] (entre 4,5 e 8 μm), devido à sua grande descontinuidade na banda de condução e casamento de parâmetros de rede; a construção de detectores e transmissores de radiação no infravermelho, na faixa espectral de 1 a 1,5 μm , para uso em telecomunicações, sendo que esta é considerada uma boa faixa de operação com fibras ópticas devido à pouca dispersão apresentada e a construção de Transistores de Elétrons de Alta Mobilidade (HEMT's), devido à alta mobilidade de elétrons na liga de InGaAs.

Por desempenharem papel importante no comportamento óptico dos materiais III-V, efeitos excitônicos foram amplamente estudados nos últimos anos, principalmente em estruturas de GaAs/AlGaAs. Mas apesar da importância tecnológica das estruturas de InGaAs/InAlAs com parâmetro de rede casado com o InP, éxcitons sob influência de campos magnéticos foram relativamente pouco estudados nesse material.

O desenvolvimento de modernas técnicas de crescimento de semicondutores permitiu o surgimento de sistemas de elétrons bidimensionais, representados por poços quânticos. Uma vez que na prática os potenciais confinantes são finitos, é impossível fabricar uma estrutura perfeitamente 2D. Portanto, em sistemas reais com confinamento em uma direção, a verdadeira dimensionalidade está entre 2D e 3D^[1.3 - 1.4].

Uma maneira de determinar a real dimensionalidade das estruturas é estudar o comportamento dos éxcitons sob influência de campos magnéticos^[1.5 - 1.6] aplicados paralelamente à direção de crescimento.

Neste trabalho estudaremos, através de medidas de magnetofotoluminescência com campos magnéticos até 12 T, a dimensionalidade de éxcitons em uma amostra contendo duas super-redes nominalmente não-dopadas de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ crescidas em seqüência uma sobre a outra no mesmo substrato de InP. Extraíndo os valores de dimensionalidade para cada super-rede, é possível determinar, através de uma expressão teórica^[1,5], a energia de ligação dos éxcitons a campo magnético nulo. Comprovamos também que a massa efetiva reduzida dos éxcitons nessas estruturas se mantém constante na faixa de temperaturas de 4 K a 45 K.

Capítulo 2

Aspectos Teóricos

2.1 – Super-redes

Desde que foram propostas por Esaki e Tsu^[2.1] em 1970, super-redes semicondutoras têm se tornado alvo de muitos estudos devido à sua grande aplicabilidade em opto-eletrônica.

Uma super-rede pode ser definida como uma estrutura semicondutora na qual um novo potencial periódico é introduzido, seja pela variação dos constituintes (materiais com diferentes *gaps*), em geral materiais semicondutores da família III-V, como GaAs, AlAs, InAs, InP e suas ligas (ex.: InGaAs, InAlAs, AlGaAs), ou por variação de dopagem, alternando camadas dopadas com camadas não dopadas. Na Figura 2.1 é mostrado o tipo mais simples e mais comum de super-rede, formada pela variação dos dois materiais constituintes A e B.

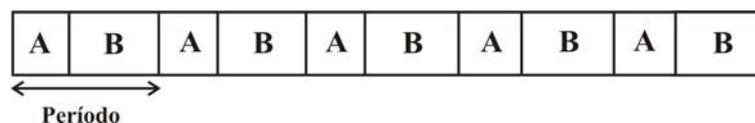


Figura 2.1 - Tipo mais simples de super-rede, formada pela alternância dos dois materiais constituintes. Observa-se a formação de um novo período na estrutura.

Matematicamente, uma super-rede infinita de período D formada por uma seqüência de poços quânticos com largura L , pode ser descrita por um potencial da forma^[2.2]:

$$V_b(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_b(z - nD), \quad (2.1)$$

onde

$$V_b(z - nD) = \begin{cases} -V_b & \text{se } |z - nD| \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \text{se } |z - nD| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.2)$$

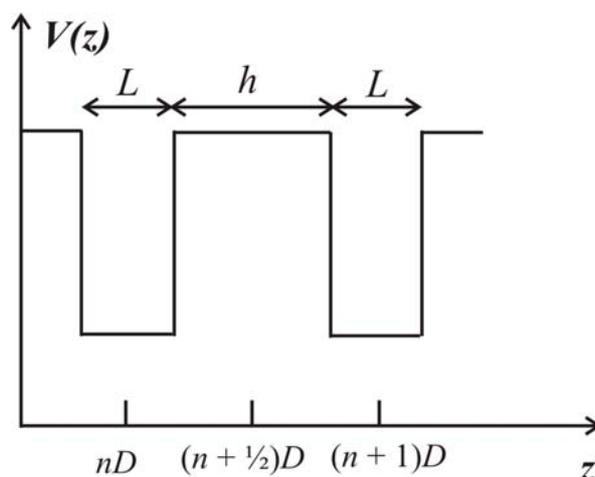


Figura 2.2 - Representação esquemática do perfil do fundo da banda de condução de parte de uma super-rede de período $D = L + h$ formada por infinitos poços. Ref. [2.2].

Outra importante característica dessas estruturas é a interação existente entre os poços de potencial quânticos, ou seja, há uma sobreposição da função de onda do estado eletrônico de um poço de potencial com as funções de onda dos poços vizinhos. Tal interação é tão mais intensa quanto menor for a espessura das barreiras de potencial, e para barreiras estreitas, leva à formação de uma mini-banda de energia com largura 2Δ ao longo da estrutura, não havendo mais níveis discretos de energia nos poços. Na Figura 2.3 é mostrada a diferença entre poços quânticos não acoplados e uma super-rede.

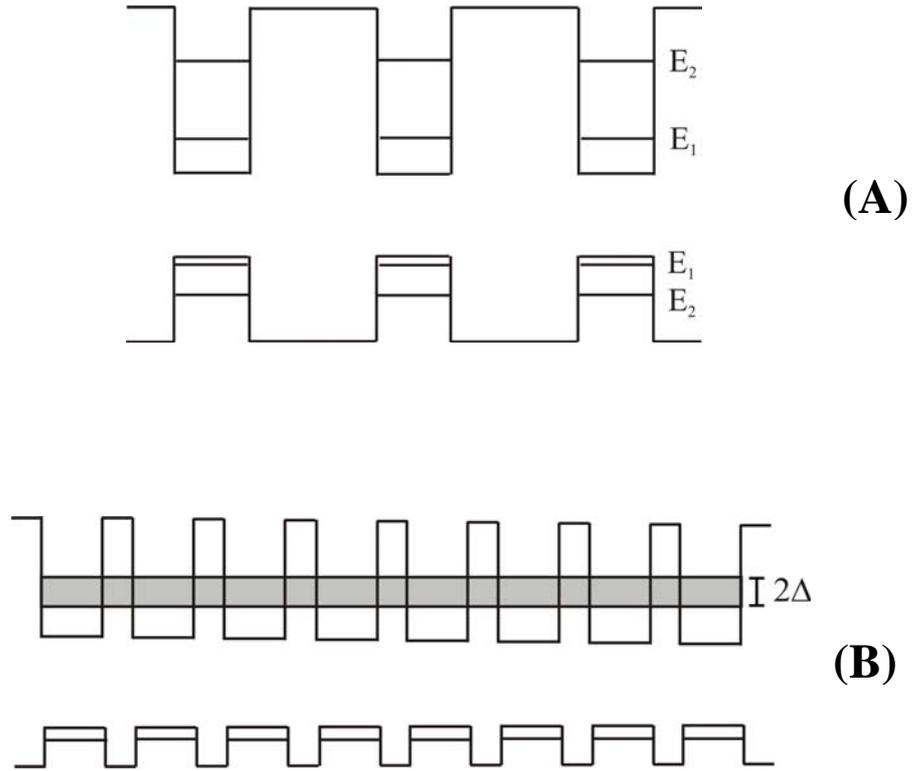


Figura 2.3 – Perfil do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência para poços quânticos não acoplados, com níveis discretos de energia (A) e para uma super-rede (B), na qual há a formação de uma mini-banda de energia ao longo de toda a estrutura.

A posição em energia e a largura das mini-bandas são determinadas resolvendo a equação de autovalor abaixo^[2.3], obtida com base no modelo Kronig-Penney:

$$\cos(KD) = \cos(\alpha L_W) \cosh(\beta L_B) + \frac{1}{2} \left(\frac{m_W^* \beta}{m_B^* \alpha} - \frac{m_B^* \alpha}{m_W^* \beta} \right) \text{sen}(\alpha L_W) \text{senh}(\beta L_B), \quad (2.3)$$

$$\text{onde } \alpha^2 = \frac{2m_W^* E}{\hbar^2}, \quad \beta^2 = \frac{2m_B^* (V - E)}{\hbar^2},$$

D é o período da super-rede, K é o vetor de onda recíproco, V é a descontinuidade de banda, m^* e L representam a massa efetiva e a espessura dos poços (com sub-índice W) e das barreiras (com sub-índice B) na banda de condução.

Na Figura 2.4^[2,3], são mostradas soluções da equação (2.3) para diferentes valores de L_B e L_W obtidas para uma super-rede de GaAs/AlAs. Pode-se observar que a largura das mini-bandas diminui rapidamente com o aumento da espessura das barreiras, uma vez que isso faz com que os poços fiquem cada vez mais isolados. Comparando as mini-bandas de elétrons e buracos pesados pode-se ver claramente que a mini-banda dos buracos é muito mais fina, o que é explicado pelo fato de eles terem uma massa efetiva bem maior que os elétrons.

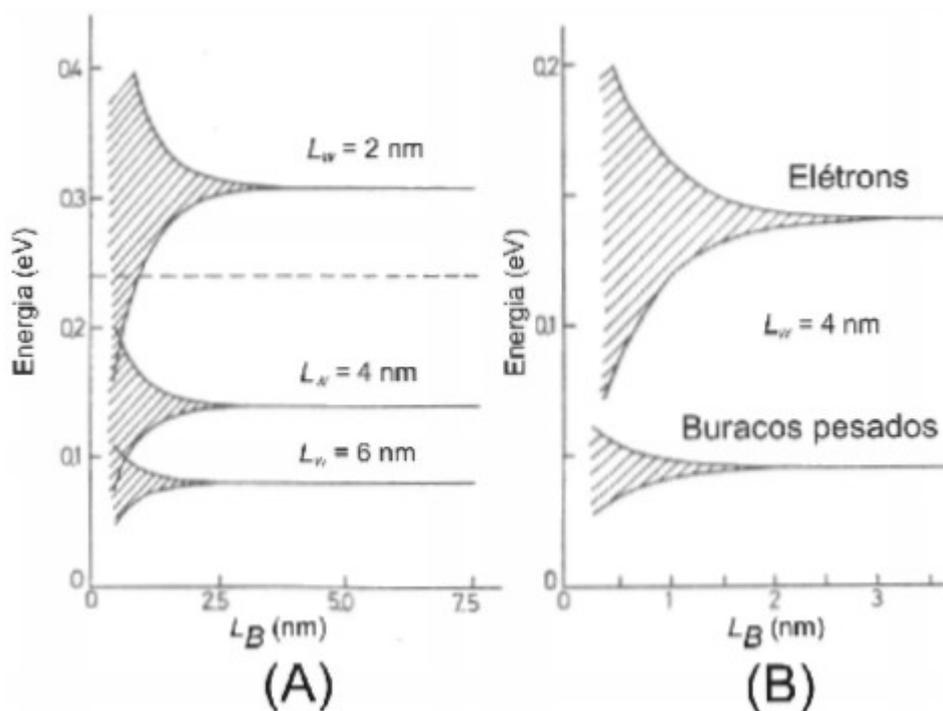


Figura 2.4 - Energias e larguras de mini-bandas calculadas para elétrons (A) e elétrons e buracos (B) em super-redes de GaAs/AlAs com diferentes espessuras de poços (L_W) e barreiras (L_B) de potencial. Ref. [2.3].

Seguindo a classificação proposta por Esaki e Tsu^[2.1], as super-redes se dividem em dois tipos, chamados tipo I e tipo II. As estruturas tipo I são as como mostradas na Figura 2.3(B), em que o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência estão numa mesma camada de semiconductor, com isso elétrons e buracos estão confinados numa mesma região do espaço. Já nas estruturas tipo II, esses pontos de máximo e mínimo estão separados tanto no espaço real quanto no espaço recíproco, fazendo com que elétrons e buracos estejam confinados em camadas diferentes.

2.2 – Efeitos de campos magnéticos sobre os níveis de energia em semicondutores

Nesta seção serão abordados teoricamente os efeitos de campos magnéticos sobre os níveis de energia em semicondutores volumétricos (*bulk*) e em estruturas de poços quânticos, quando esses campos são aplicados paralela e perpendicularmente à direção de crescimento do cristal, que será adotada como sendo a direção ao longo do eixo z .

2.2.1 – Cristal volumétrico (bulk)

Em um cristal volumétrico podemos considerar os elétrons na banda de condução como livres, uma vez que o potencial da rede cristalina já está implícito na massa efetiva, que em geral é um tensor de nove componentes^[2.4]:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (2.4)$$

onde $E(k)$ é a relação de dispersão das bandas de energia. Mas para semicondutores do grupo III-V, uma boa aproximação é considerar que próximo ao mínimo da banda de condução, a relação de dispersão tem a forma de um parabolóide, ou seja, as massas efetivas não dependem da direção, tendo o mesmo valor ao longo dos eixos k_x , k_y e k_z . Sendo assim, podemos escrever a massa efetiva como:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2}. \quad (2.5)$$

Com isso, vamos supor de agora em diante que a massa efetiva é escalar e constante.

Aplicando o campo magnético, o momento linear total dos elétrons será alterado, segundo a transformação $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$, onde e é a carga do elétron, \vec{A} é o potencial vetor e $\vec{p} = p_x\hat{x} + p_y\hat{y} + p_z\hat{z}$. Com isso o Hamiltoniano para os elétrons em presença de um campo magnético será:

$$H = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - e\vec{A})^2. \quad (2.6)$$

Para o cálculo dos níveis de energia em um cristal volumétrico, usaremos um calibre com $\vec{A} = -yB_0\hat{x}$, o que através da relação $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ nos dá um campo magnético uniforme ao longo da direção z : $\vec{B} = B_0\hat{z}$.

Substituindo esse potencial vetor em (2.6), temos o Hamiltoniano para esta configuração, que é dado por:

$$H = \frac{1}{2m^*} [(p_x + eyB_0)^2 + p_y^2 + p_z^2]. \quad (2.7)$$

Uma vez que $[H, p_x] = 0$, podemos escolher auto-estados comuns para estes dois operadores, escrevendo assim duas equações de autovalor:

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (2.8)$$

$$p_x\psi(x, y, z) = \hbar k_x\psi(x, y, z) \quad (2.9)$$

Fazendo a separação de variáveis $\psi(x, y, z) \equiv X(x)\varphi(y, z)$, pode-se chegar, através de (2.9), a $X(x) = e^{ik_x x}$. Usando mais uma vez o fato de que p_x comuta com H , este pode ser considerado uma constante de movimento na equação para H . Ou seja, podemos usar $p_x = \hbar k_x$ no Hamiltoniano em (2.8).

Reescrevendo (2.8) temos:

$$\frac{1}{2m^*} [(\hbar k_x + eyB_0)^2 + p_y^2 + p_z^2] e^{ik_x x} \varphi(y, z) = E e^{ik_x x} \varphi(y, z). \quad (2.10)$$

Definindo

$$y_0 \equiv \frac{\hbar k_x}{eB_0} \quad \text{e} \quad \omega_c \equiv \frac{eB_0}{m^*}, \quad (2.11)$$

e substituindo os operadores $p_y^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ e $p_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, (2.10) pode ser escrita como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (y + y_0)^2 \right] \varphi(y, z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \varphi(y, z)}{\partial z^2} = E \varphi(y, z). \quad (2.12)$$

Fazendo uma nova separação de variáveis $\varphi(y, z) \equiv Y(y)Z(z)$, com $E = E_z + E_y$, a equação resultante para z tem como resultado $Z(z) = e^{ik_z z}$, com $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$. A equação para y é a equação para um oscilador harmônico simples unidimensional:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (y + y_0)^2 \right] Y(y) = E_y Y(y), \quad (2.13)$$

cujas energias permitidas são: $E_y = \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$, com $n_y = 0, 1, 2, 3, \dots$

Portanto, as energias permitidas para um cristal volumétrico, sujeito a um campo magnético são:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (2.14)$$

onde o índice n indica o nível de Landau e ω_c é a frequência de ciclotron.

Uma vez que para um cristal volumétrico não há uma direção preferencial, não importa ao longo de qual eixo, x , y ou z , o campo magnético é aplicado. O resultado será sempre o mesmo.

2.2.2 – Estrutura com poços quânticos

Para uma estrutura com poços quânticos, a única mudança a ser feita é somar o potencial $V(z)$ dos poços no Hamiltoniano do sistema, dado pela equação (2.6). Com isso,

$$H = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(z). \quad (2.15)$$

Neste caso, é importante distinguir a direção do campo magnético em relação à direção de crescimento da estrutura, ou seja, em relação à direção na qual existe o potencial de confinamento $V(z)$.

2.2.2.1 - Campo paralelo à direção de crescimento

Aqui, assim como para o cristal volumétrico, será usado o calibre $\vec{A} = -yB_0\hat{x}$, dando o mesmo campo magnético: $\vec{B} = B_0\hat{z}$. Nesse caso, o Hamiltoniano do sistema é escrito como:

$$H = \underbrace{\frac{1}{2m^*} [(p_x + eyB_0)^2 + p_y^2]}_{H_{xy}} + \underbrace{\left[\frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \right]}_{H_z}. \quad (2.16)$$

O termo H_z é o Hamiltoniano para os elétrons nos poços de potencial a campo magnético nulo, e cujas soluções são os níveis de energia dos poços, E_l .

O termo H_{xy} é o análogo bidimensional de (2.7) e o método de solução é o mesmo da seção 2.2.1, levando ao aparecimento dos níveis de Landau.

Com isso, as energias permitidas para poços quânticos sujeitos a um campo magnético paralelo à direção de crescimento são:

$$E = E_l + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (2.17)$$

onde $n_y = 0, 1, 2, 3, \dots$

Sendo assim, os níveis de energia dos poços se dividem em níveis de Landau e sofrem um deslocamento para valores maiores, proporcional à intensidade do campo magnético, o que pode ser visto pela definição de ω_c em (2.11). Esse deslocamento acontece tanto na banda de valência como na banda de condução.

2.2.2.2 - Campo perpendicular à direção de crescimento

Mantendo z como a direção de crescimento, será usado o calibre $\vec{A} = -zB_0\hat{y}$, que resulta num campo magnético $\vec{B} = B_0\hat{x}$.

A solução completa e detalhada pode ser vista no Apêndice. Aqui ela será mostrada de forma resumida.

O Hamiltoniano para essa configuração é:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[p_x^2 + (p_y + ezB_0)^2 + p_z^2 \right] + V(z). \quad (2.18)$$

Como H e p_y comutam, podemos escrever equações análogas a (2.8) e (2.9) para eles. Fazendo $\psi(x, y, z) \equiv Y(y)\chi(x, z)$ podemos eliminar a dependência em y , e (2.18) fica com a seguinte forma:

$$H = \underbrace{\frac{p_x^2}{2m^*}}_{H_x} + \underbrace{\left\{ \frac{1}{2m^*} \left[p_z^2 + e^2 B_0^2 (z - z_0)^2 \right] + V(z) \right\}}_{H_z}, \quad (2.19)$$

onde $z_0 \equiv -\frac{\hbar k_y}{eB_0}$.

A parte em x de (2.19) fornece as energias de uma partícula livre, enquanto H_z pode ser escrito da seguinte forma:

$$H_z = \left[\frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \right] + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} (z - z_0)^2. \quad (2.20)$$

A solução de H_z é obtida usando teoria de perturbação independente do tempo até primeira ordem, onde o Hamiltoniano não perturbado ($H_z^{(0)}$) é o termo entre colchetes em (2.20) e o Hamiltoniano de perturbação ($H_z^{(1)}$) é o termo dependente do campo magnético. Essa solução é válida somente se a energia de confinamento dos elétrons é significativamente maior que a energia de ciclotron.

As auto-energias de H_z são $\varepsilon_z = \varepsilon_z^{(0)} + \varepsilon_z^{(1)}$, onde os $\varepsilon_z^{(0)}$ são os autovalores de $H_z^{(0)}$, ou seja, os níveis de energia E_l dos poços sem aplicação de campo magnético. A correção em primeira ordem para as auto-energias é obtida fazendo $\varepsilon_z^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H_z^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$, onde os $|\psi_n^{(0)}\rangle$ são os auto-estados normalizados de $H_z^{(0)}$.

Tendo $\varepsilon_z^{(1)}$, podemos escrever as energias permitidas para elétrons em poços quânticos sob a ação de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento do cristal:

$$E = E_l + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \right) + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_y + eB_0 \langle z \rangle \right)^2, \quad (2.21)$$

onde $\langle z^2 \rangle$ e $\langle z \rangle$ são, respectivamente, as médias de z^2 e z para as funções de onda não perturbadas. O terceiro termo em (2.21) é usualmente chamado de desvio diamagnético e provoca um desvio nos valores de energia proporcional a B_0^2 e à

diferença $(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2)$, enquanto o quarto termo é uma dependência parabólica em k_y . O resultado acima é citado por Mann^[2.5] em seu trabalho sobre efeitos de campos magnéticos em super-redes.

2.3 – Éxcitons

2.3.1 – Éxcitons em cristal volumétrico (*bulk*)

Em cristais semicondutores, a absorção de um fóton com energia maior ou igual ao *gap* do material pode transferir a um elétron na banda de valência energia suficiente para que este passe para a banda de condução. O elétron na banda de condução interage com o buraco correspondente na banda de valência, podendo ocorrer a formação de um sistema ligado via um potencial coulombiano. A esse par ligado dá-se o nome de éxciton, que, por ser formado por um elétron e um buraco, é eletricamente neutro. O resultado de tal interação é uma diminuição da energia do par elétron-buraco de uma quantidade E_x , a energia de ligação do éxciton.

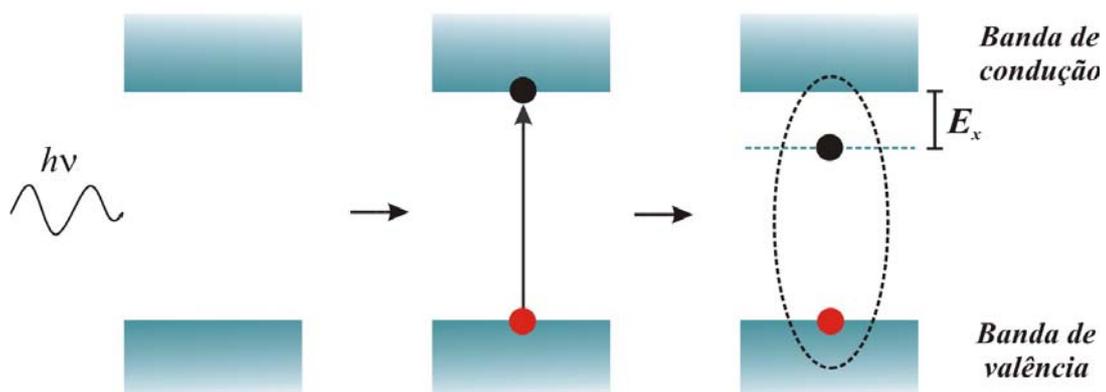


Figura 2.5 – A absorção de um fóton com energia $h\nu$ promove um elétron (preto) da banda de valência para a banda de condução, de onde este interage com o buraco correspondente (vermelho) via potencial coulombiano.

Para os éxcitons mais fracamente ligados, chamados éxcitons de Mott-Wannier, pode-se usar uma aproximação na qual o éxciton é um sistema semelhante a um átomo de hidrogênio^[2.6]. Com isso, a equação de Schrödinger para o par elétron-buraco é^[2.7]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \right) \psi_\lambda(\mathbf{r}) = E_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

onde

$$\frac{1}{\mu^*} \equiv \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}, \quad (2.23)$$

é a massa reduzida efetiva para o par formado por um elétron (com massa efetiva m_e^*) e um buraco (com massa efetiva m_h^*), ϵ_r é a constante dielétrica do material e $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ é a separação entre o elétron e o buraco. A função de onda $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ é dada por^[2.8]:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \varphi_e(\mathbf{r}_e) \varphi_h(\mathbf{r}_h) \varphi_{ex}(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

onde Ω é uma constante de normalização, $\varphi_e(\mathbf{r}_e)$ é a função de onda dos elétrons, $\varphi_h(\mathbf{r}_h)$ é a função de onda dos buracos, $\varphi_{ex}(\mathbf{r})$ representa o movimento relativo entre um elétron e um buraco e $\mathbf{K} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h$ e \mathbf{R} são o vetor de onda e a posição do centro de massa do éxciton, respectivamente.

Para esses éxcitons, a relação de dispersão é dada por^[2.8]:

$$E_{ex}(n_B, \mathbf{K}) = E_g - R_y^* \frac{1}{n_B^2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2M}, \quad (2.25)$$

onde $M = m_e + m_h$ é a massa total do éxciton, $n_B = 1, 2, 3, \dots$ é o número quântico principal, que indica o nível de energia excitônica, e R_y^* é a constante de Rydberg efetiva, dada por^[2.9]:

$$R_y^* = \frac{\mu^*}{4c\pi\hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \right)^2, \quad (2.26)$$

onde c é a velocidade da luz.

Uma representação dos níveis de energia dos éxcitons é mostrada na Figura 2.6^[2.6].

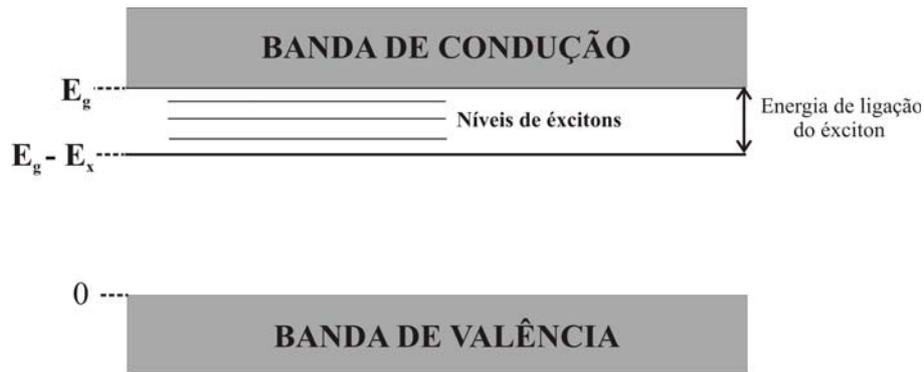


Figura 2.6 – Níveis de energia de éxcitons em um semicondutor, em que o “zero” de energia está no topo da banda de valência. A energia de ligação do éxciton é E_x . O nível em $E_g - E_x$ indica o éxciton 1S (a transição óptica de menor energia), enquanto o nível em E_g indica o nível com n infinito. Ref.[2.6].

Existem várias maneiras de se determinar a energia de ligação dos éxcitons experimentalmente. Uma delas é através de medidas de fotoluminescência, onde se observa um pico de emissão com energia um pouco abaixo da energia esperada. Essa energia esperada é E_g para o caso de cristais volumétricos e $E_g + E_e + E_h$ para poços quânticos, onde E_e e E_h são as energias dos níveis dos elétrons na banda de condução e dos buracos na banda de valência, respectivamente.

Outro parâmetro importante para um éxciton é o raio de Bohr, determinado por^[2.8]:

$$a_B^{ex} = \epsilon_r \left(\frac{m_0}{\mu^*} \right) a_B^H, \quad (2.27)$$

onde m_0 é a massa de repouso do elétron e a_B^H é o raio de Bohr do átomo de hidrogênio ($\sim 0,5 \text{ \AA}$).

Observa-se para semicondutores em geral que^[2.8] $1 \text{ meV} \leq R_y^* \leq 200 \text{ meV}$ e $50 \text{ nm} \geq a_B^{ex} \geq 1 \text{ nm} >$ parâmetro de rede do cristal.

2.3.2 – *Éxcitons em poços quânticos*

Para um poço quântico, a função de onda dos éxcitons tem uma forma semelhante à mostrada em (2.24), sendo dada por^[2.10]:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = D^{-1/2} \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) \varphi_{ex}(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

onde D é a área do poço, z_e é a coordenada de um elétron ao longo da direção perpendicular às camadas do poço, z_h é o correspondente para o buraco e \mathbf{r} e $\varphi_{ex}(\mathbf{r})$ representam a distância entre o elétron e o buraco e o movimento relativo entre estes no plano do poço, respectivamente. A parte dependente do centro de massa foi omitida supondo uma regra de seleção em \mathbf{K} para transições ópticas.

Teoricamente, um sistema de poços quânticos é um sistema perfeitamente bidimensional, mas na prática será sempre um caso intermediário entre bidimensional e tridimensional. Greene e Bajaj^[2.11] fizeram cálculos variacionais para obter as energias de ligação de éxcitons em poços quânticos de GaAs com barreiras de AlGaAs em função das larguras e concluíram que tanto para os éxcitons formados com buracos leves como para os formados com buracos pesados, a energia de ligação aumenta à medida que o poço tem sua largura diminuída até um valor limite, abaixo da qual E_x diminui.

O efeito da dimensionalidade nos sistemas excitônicos aparece de forma mais visível nas suas energias de ligação. Os níveis de energia excitônica foram calculados para estruturas com dimensão $\alpha = 1, 2$ ou 3 e são dados por^[2.12–2.13]:

$$E_n = -\frac{R_y^*}{[n + (\alpha - 3)/2]^2} \quad (2.29)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$ é o índice que indica o nível de energia excitônica e R_y^* é a constante de Rydberg efetiva para um éxciton 3D, que é dada pela equação (2.26).

A Equação (2.29) leva a expressões já bem conhecidas na literatura para as energias de ligação para éxcitons bi e tridimensionais^[2.8]. A energia de ligação E_x do éxciton é obtida fazendo $n = 1$ (estado 1S) em (2.29) e $\alpha = 3, 2, 1$, tendo como resultado $E_x = R_y^*, 4R_y^*$ e ∞ , para sistemas tridimensionais, bidimensionais e unidimensionais, respectivamente.

2.4 – Energia de ligação dos éxcitons em função do campo magnético

Para estudar o comportamento da energia de ligação de éxcitons sob influência de um campo magnético aplicado paralelamente à direção de crescimento do cristal, é conveniente considerar uma região de baixos valores de campo e uma outra para valores intensos. A distinção é feita comparando a energia de ciclotron $\hbar\omega_c$ com a energia de Rydberg R_y^* . Para $\hbar\omega_c \ll R_y^*$, estamos no regime de campos baixos, onde a energia de Coulomb é dominante e o campo magnético é tratado como uma perturbação. Quando $\hbar\omega_c \gg R_y^*$, o éxciton está no regime de campos intensos, no qual os níveis de Landau são mais importantes que a energia de Coulomb.

Para o regime de baixos campos, Mowbray^[2.14] *et al.* usaram um resultado obtido através de teoria de perturbação de primeira ordem para o deslocamento diamagnético sofrido pelos éxcitons 1S em poços quânticos, que é dado por:

$$\Delta E_{dia} = D_1 \frac{\epsilon_0^2 \epsilon_r^2 \hbar^4 B^2}{4\pi^2 e^2 (\mu^*)^3}, \quad (2.30)$$

onde D_l é um parâmetro que indica a dimensionalidade dos éxcitons nos poços, tomando valores entre 3/16 (2D) e 1 (3D). Tais valores limite para o parâmetro D_l são também apresentados em cálculos feitos por Thilagam^[2.15], que calculou a dimensionalidade de éxcitons em poços quânticos de GaAs/AlGaAs sujeitos a campos magnéticos até 10 T.

O comportamento de éxcitons na presença de campos magnéticos intensos foi estudado pela primeira vez por Akimoto e Hasegawa^[2.16], que previram teoricamente a coexistência de níveis de Landau e níveis de éxcitons em semicondutores.

Rogers^[2.17] *et al.* estudaram experimentalmente amostras de GaAs/AlGaAs para campos magnéticos até 16 T. Para campos magnéticos intensos, em que $\hbar\omega_c \gg R_y^*$, os resultados por eles obtidos confirmam o modelo teórico de Akimoto e Hasegawa. De acordo com esses autores, a energia de ligação dos éxcitons em função do campo magnético aplicado pode ser escrita como:

$$E_x(B) = 3R_y^* \left[\frac{\hbar e}{2(2n_l + 1)\mu^* R_y^*} \right]^{1/2} D_2 B^{1/2}, \quad (2.31)$$

onde $n_l = 0, 1, 2, 3, \dots$ é o índice que indica o nível de Landau e D_2 é um parâmetro que indica a dimensionalidade do sistema de éxcitons, tomando valores entre 1 (2D) e 0,25 (3D). Essa faixa de variação para D_2 foi escolhida de modo que os valores limites da expressão acima estejam de acordo com os valores da energia de ligação dados em (2.25). Sabendo a dimensionalidade dos éxcitons, a energia de ligação a $B = 0$ T é dada por^[2.16]

$$E_x(0) = 4R_y^* D_2. \quad (2.32)$$

Capítulo 3

Técnica experimental e esquema de medida

3.1 – Fotoluminescência

O termo luminescência inclui todos os tipos de emissão de luz resultantes de algum ganho de energia pelo material emitente, exceto emissão incandescente. Há diferentes maneiras de se excitar um material para causar a luminescência, como por exemplo a excitação por feixes de elétrons ou raios X, aplicação de altos campos elétricos via ionização e excitação óptica^[3.1].

A fotoluminescência pode ser definida como a emissão de luz por um material excitado para um estado de não equilíbrio através de absorção de luz. Pode também ser explicada como sendo a operação simétrica da absorção^[3.2], uma vez que os fótons absorvidos excitam os elétrons no material, levando-os a um estado de não equilíbrio a partir do qual voltam ao estado fundamental emitindo luz; enquanto os fótons transmitidos são analisados num espectro de absorção.

Entre os tipos de fotoluminescência, a fosforescência é aquela em que, removida a excitação, a emissão pode durar longos intervalos de tempo (até muitos minutos), enquanto na fluorescência os elétrons excitados têm tempo de vida curto no estado de não equilíbrio, da ordem de até nanosegundos.

Em semicondutores, quando um fóton com energia $\hbar\omega$ é absorvido, um elétron é excitado de um estado $|i\rangle$ da banda de valência para um estado $|f\rangle$ na banda de condução, formando assim um par elétron-buraco. Após um certo intervalo de tempo (tempo de vida), o elétron excitado recombina com um buraco, podendo esta recombinação ser de natureza radiativa ou não. Quando a recombinação é radiativa, os fótons emitidos têm energia $\varepsilon_f - \varepsilon_i \leq \hbar\omega$.

A principal razão para se usar a fotoluminescência como técnica para análise de semicondutores é a sua alta sensibilidade, o que permite observar em detalhes os processos de recombinação radiativos. Enquanto um espectro de absorção fornece detalhes sobre a densidade de estados da amostra, um espectro de fotoluminescência é capaz de fornecer detalhes sobre níveis de impurezas (doadoras e aceitadoras) e éxcitons, que geralmente estão presentes em cristais semicondutores.

Apesar de poder ser definida como operação simétrica da absorção, observa-se que para poços quânticos as linhas de luminescência e de absorção não são coincidentes, ou seja, a amostra não absorve e emite na mesma energia. A essa separação em energia entre as linhas dá-se o nome de deslocamento Stokes. Tal separação pode ser explicada supondo que a luminescência é uma sobreposição dos processos de recombinação de éxcitons em estados estendidos, éxcitons confinados devido ao potencial dos poços e éxcitons ligados a impurezas. Em amostras consideradas de alta qualidade (baixa concentração de impurezas), observa-se uma redução simultânea da largura das linhas espectrais e do deslocamento Stokes^[3.1].

Um experimento de fotoluminescência típico em materiais semicondutores consiste em excitar a amostra com um laser de energia fixa $\hbar\omega > E_g$, onde E_g é a energia de banda proibida do material (*gap*), promovendo assim elétrons da banda de valência para a banda de condução. Esses elétrons decaem em tempos muito curtos para o nível fundamental através de processos de termalização não radiativos e então recombina com os buracos emitindo radiação. O decaimento não radiativo ocorre em geral através de espalhamento por fônons ópticos longitudinais, com tempo de vida típico da ordem de 10^{-12} s. O espectro de fotoluminescência é obtido registrando a intensidade da luz emitida pela amostra em função da energia da radiação emitida.

Na Figura 3.1^[3.3] são mostradas as transições ópticas mais comumente observadas em um espectro de fotoluminescência em materiais semicondutores.

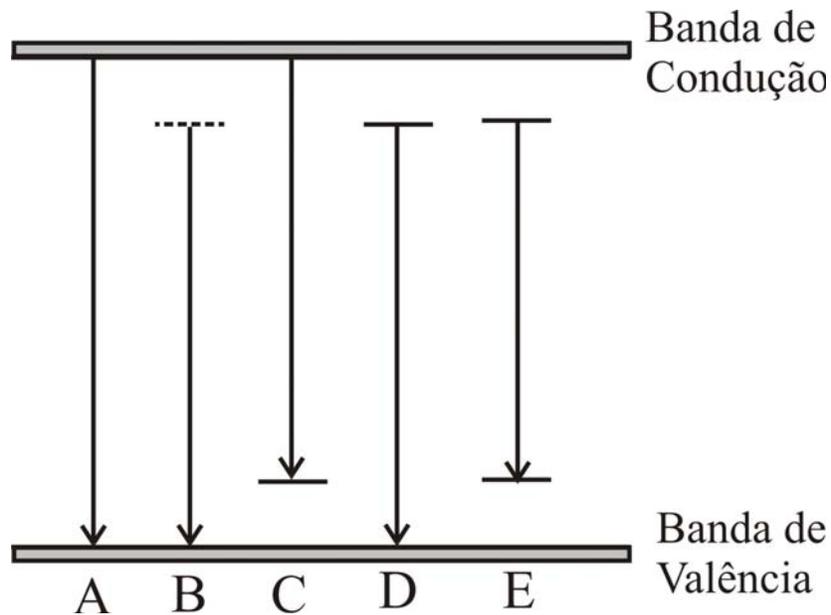


Figura 3.1 - Transições ópticas mais comuns em um espectro de fotoluminescência. São elas: recombinação banda a banda (A), transição excitônica (B), elétron livre para aceitador (C), éxciton ligado a um doador (D) e doador para aceitador (E). Ref. [3.3].

Entre as técnicas complementares à fotoluminescência, podemos citar a fotoluminescência de excitação. Esta é mais usada no estudo de níveis excitados dentro de poços quânticos, uma vez que na fotoluminescência, os elétrons excitados decaem rapidamente por termalização, não permitindo estudar os estados de mais alta energia dos poços. Essa técnica consiste em manter a posição do espectrômetro fixa em um pico de emissão já conhecido (geralmente a transição fundamental) e variar a energia de excitação da amostra dentro de uma determinada faixa. Sempre que a energia do laser de excitação coincidir com a diferença em energia entre um nível excitado e o topo da banda de valência a probabilidade de absorção de fótons tem um máximo, ou seja, a probabilidade de elétrons na banda de valência serem excitados é maior. Quando esses elétrons decaem para o estado de energia da banda de condução que está envolvido na transição correspondente ao comprimento de onda no qual o espectrômetro está fixo, ocorre um máximo na luminescência. Em outras palavras, máximos em um espectro de

fotoluminescência de excitação coincidem com ressonâncias entre as energias das transições envolvendo estados excitados.

3.2 – *Montagem experimental*

A Figura 3.2 mostra um diagrama esquemático da montagem experimental usada para realizar as medidas de magnetofotoluminescência.

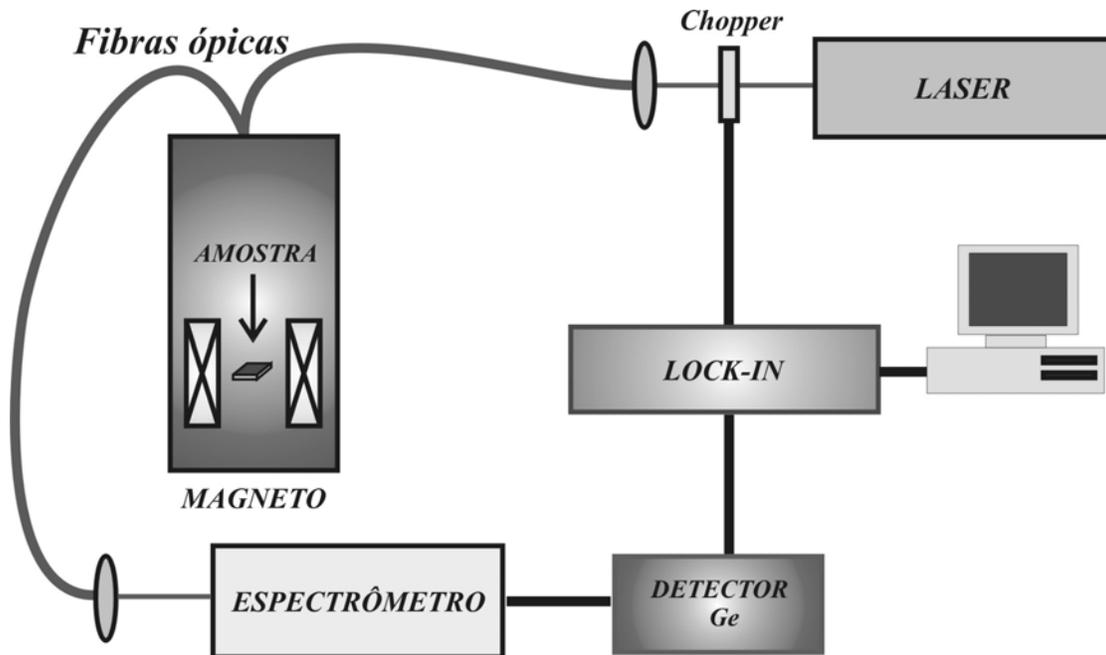


Figura 3.2 - Montagem experimental usada nas medidas de magnetofotoluminescência.

A amostra é fixa a um porta-amostras colocado na ponta de uma haste e então é inserida em um criostato de temperatura variável (que permite variar a temperatura da amostra entre 2 K e 300 K) no interior de um magneto supercondutor. Esse porta-amostras, que foi especialmente feito para esse experimento, permite medidas variando o ângulo entre a amostra e a direção do campo magnético de 0 a 180°. Na haste há também

um diodo de silício, usado como sensor de temperatura. Para a variação da temperatura da amostra, usamos um controlador de temperatura *Neocera LTC21* em um sistema de fluxo de hélio. Esse hélio é obtido, através de uma válvula agulha, do próprio banho de hélio líquido que resfria a bobina supercondutora.

Usamos um laser de argônio com $\lambda = 514,5$ nm para excitar a amostra. O magneto supercondutor *Cryogenic Ltd.* é capaz de atingir campos magnéticos de até 12 T e é constituído por duas bobinas concêntricas de um material supercondutor quando à temperatura de hélio líquido (4,2 K).

A luz emitida pela amostra é levada ao espectrômetro SPEX 0,75 m. Após a dispersão da luz na rede de difração, a intensidade em cada comprimento de onda é registrada por um detector de diodo de germânio p-i-n resfriado à temperatura de nitrogênio líquido (77 K) e alimentado com uma tensão contínua de 250 V. Para redução de ruído e aumento de sensibilidade, o laser de excitação é modulado por um *chopper* operando na frequência de 130 Hz, um valor diferente de múltiplos de 60 Hz, para evitar a interferência da rede elétrica. Essa frequência é usada como sinal de referência por um filtro-amplificador *lock-in*, que compara a frequência do sinal de entrada (vindo do detector) com a frequência do sinal de referência (do *chopper*). O sinal é então amplificado e mandado para um computador.

Para fazer o acoplamento entre o criostato do magneto, onde estava a amostra, e o espectrômetro, foi utilizado um cabo de fibras ópticas. A escolha por um único cabo foi devido à perda de luz (tanto do laser como do sinal de luminescência) que sempre ocorre em conexões entre cabos. Esse único cabo foi feito com cinco fibras ópticas: uma com diâmetro interno de 400 μm usada para levar o laser até a amostra e outras quatro de 100 μm para levar o sinal de luminescência da amostra até o espectrômetro. O uso de fibras com diâmetros diferentes foi necessário devido a um problema detectado tanto com as fibras de 400 μm , como com outras do mesmo fabricante à disposição no laboratório (200 μm e 365 μm): elas apresentaram uma absorção total na região espectral próxima a 1400 nm, sendo essa a região de emissão de uma das super-redes presentes na amostra estudada neste trabalho.

Na Figura 3.3 são mostrados espectros de fotoluminescência de uma amostra de super-redes de InAlAs/InGaAs, estudada neste trabalho (para detalhes da amostra veja o

Capítulo 4), em duas condições diferentes: em (A) a amostra estava em um criostato de dedo frio localizado ao lado do espectrômetro, não sendo necessário o uso de fibras ópticas. Já em (B), a amostra estava no criostato do magneto, a $B = 0$ T, e foram usadas fibras ópticas de $200\ \mu\text{m}$ para levar o sinal de luminescência até o espectrômetro. Nota-se que no espectro obtido usando as fibras ópticas de $200\ \mu\text{m}$ não se observa o pico relativamente intenso em torno de $1400\ \text{nm}$, indicando que essa fibra óptica deve ter uma absorção pronunciada nesta faixa de comprimentos de onda.

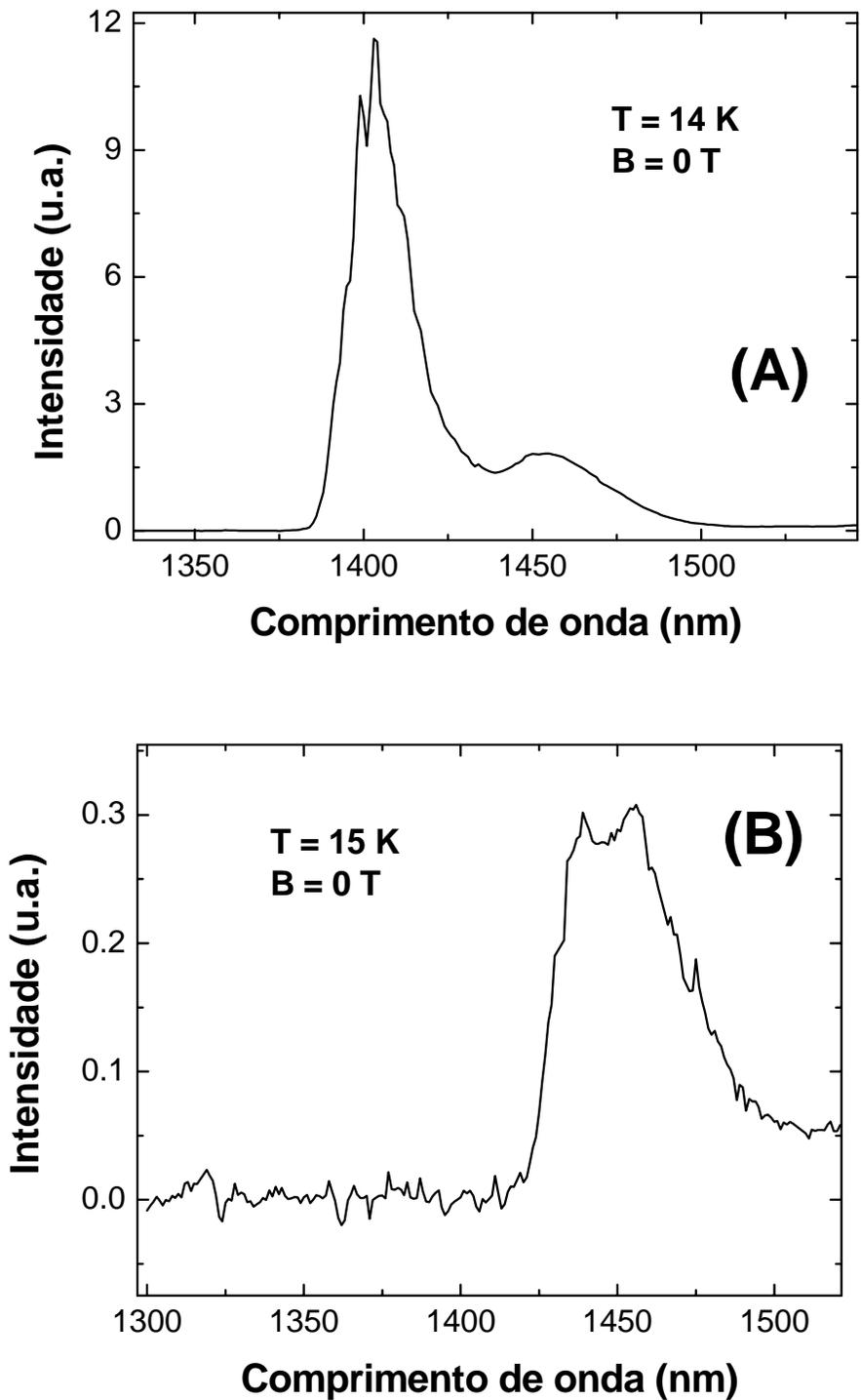
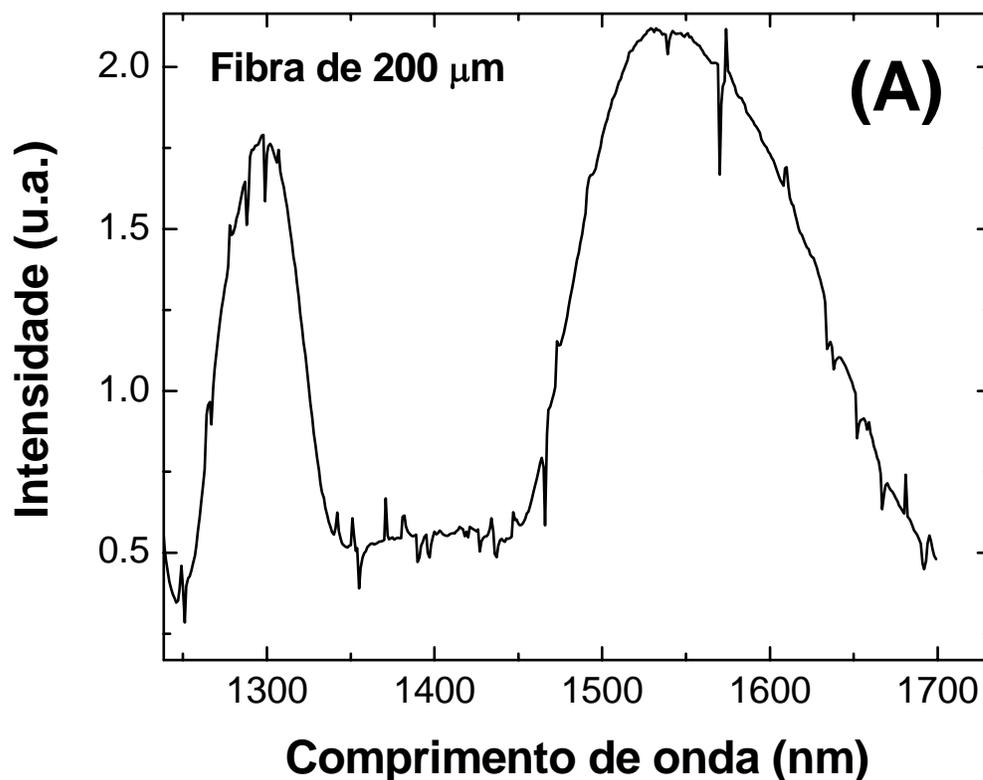


Figura 3.3 – Espectros de luminescência obtidos com a amostra em um criostato de dedo frio, dispensando o uso de fibras ópticas (A) e no criostato do magneto a $B = 0 \text{ T}$, usando fibras de $200 \mu\text{m}$ (B). Espectros semelhantes ao apresentado em (B) foram obtidos usando as demais fibras do mesmo fabricante. Nota-se que usando as fibras ópticas, o pico de luminescência em 1400 nm não é observado.

Na Figura 3.4 são mostrados espectros de transmissão da luz branca para as fibras de 200 μm e de 100 μm . A fibra de 200 μm apresenta uma forte absorção na faixa entre 1350 nm e 1450 nm, o que impede que o pico em torno de 1400 nm das super-redes seja observado (Figura 3.3). Já a fibra de 100 μm transmite relativamente bem nessa faixa, sendo por essa razão a fibra escolhida para levar o sinal da amostra ao espectrômetro.

Apesar de não serem conhecidas informações técnicas a respeito das fibras ópticas usadas, a comparação entre os espectros de transmissão nos leva a supor que a fibra de 100 μm tem uma composição diferente das demais. Tal suspeita se baseia no comportamento diferente das curvas de transmissão dessas fibras. Para a fibra de 200 μm , a região de 1400 nm é uma região de absorção forte, enquanto para a de 100 μm há apenas uma queda na eficiência, ou seja, a razão entre a transmissão nessa faixa e uma das faixas de máximo, por exemplo 1500 nm, é ainda considerável.

Também com base nas curvas de transmissão mostradas na Figura 3.4, é possível confirmar que realmente as faixas próximas a 1330 nm e 1550 nm são boas faixas de operação com fibras ópticas, uma vez que há máximos de transmissão nelas, para todas as fibras investigadas.



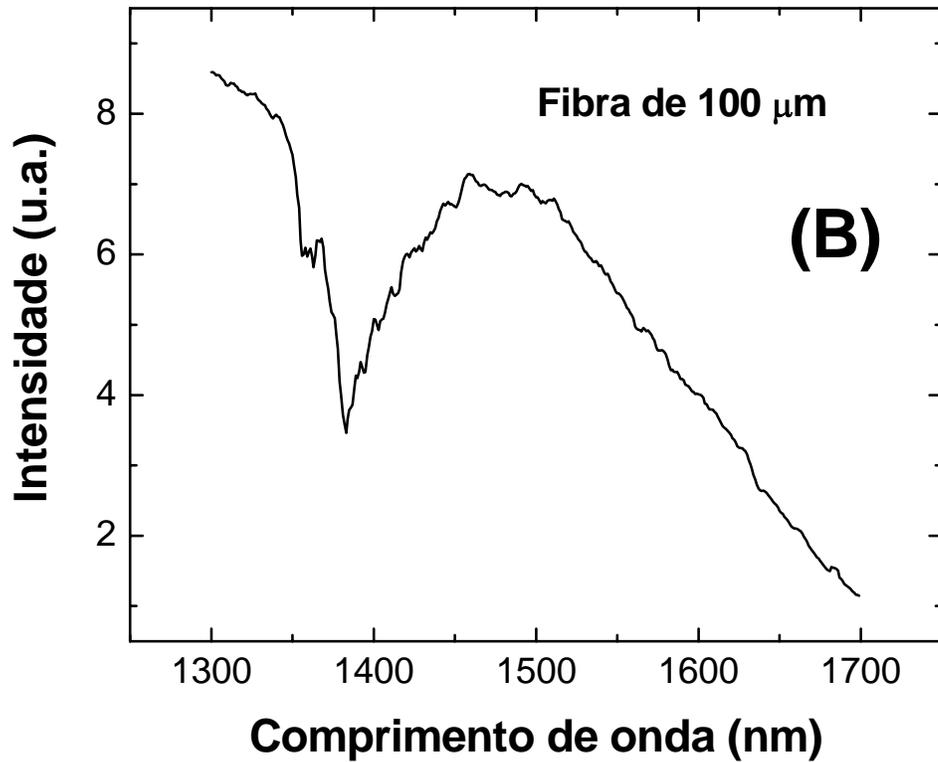


Figura 3.4 – Espectros de transmissão da luz branca para as fibras ópticas com diâmetros internos de 200 μm (A) e de 100 μm (B). O comportamento diferente na região de 1400 nm explica a ausência de um dos picos de luminescência da amostra quando essa é medida usando a fibra de 200 μm. Também é possível observar que as regiões de 1330 nm e 1550 nm são realmente boas faixas para operação com fibras ópticas, sendo regiões de grande transmissão.

Capítulo 4

Medidas e resultados experimentais

4.1 – A amostra

As medidas de magnetofotoluminescência foram feitas em uma amostra contendo duas super-redes semicondutoras nominalmente não-dopadas de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ crescidas sobre um mesmo substrato de InP. As concentrações de índio, gálio e alumínio foram escolhidas de maneira que essas duas ligas tenham o mesmo parâmetro de rede que o substrato.

As duas super-redes são diferentes somente nas larguras de poços e barreiras de potencial. A super-rede mais interna, denominada SL 1, tem poços de 10 nm de largura e barreiras com 5 nm, enquanto a mais externa, SL 2, tem poços de 8 nm e barreiras de 10 nm. As duas super-redes foram crescidas uma sobre a outra, sem camadas intermediárias entre elas, sendo cada uma formada por uma seqüência de 20 poços quânticos.

Nas Figuras 4.1 e 4.2 são mostrados, respectivamente, o esquema de crescimento da amostra e um diagrama esquemático reduzido dos extremos de suas bandas de energia^[4.1].

Sobre o substrato de InP foi crescida uma camada de acomodação (*buffer*) de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ com 0,25 μm de espessura para evitar que possíveis defeitos ou impurezas do substrato se propagassem pelas estruturas. Sobre as super-redes foi crescida uma camada final de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ com 2,5 nm de espessura com a finalidade de proteger as amostras contra a oxidação.

Esta amostra foi crescida por Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) por Ivan F. L. Dias (UEL) e J. C. Harmand (CNRS, França). Uma vez que essa amostra foi uma das primeiras a serem crescidas na câmara de MBE usada, é possível que haja uma diferença entre as espessuras nominais e as reais de poços e barreiras. Medidas de difração de raios X, ainda em análise, indicam um pequeno descasamento dos

parâmetros de rede, bem como valores um pouco menores que os nominais para as espessuras das camadas de InGaAs e InAlAs. Também devido ao fato de ter sido crescida logo após o fechamento da câmara de MBE, é possível que haja na amostra um nível de impurezas residuais relativamente alto ($\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$).

Nos cálculos e análises que faremos a seguir, usaremos os valores nominais para as espessuras dos poços e das barreiras de potencial.

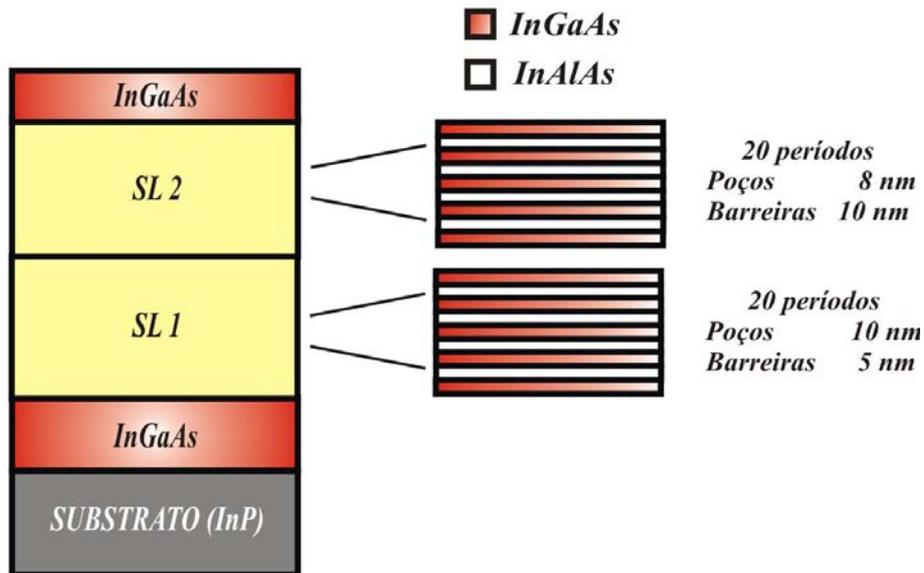


Figura 4.1 - Esquema de crescimento da amostra.

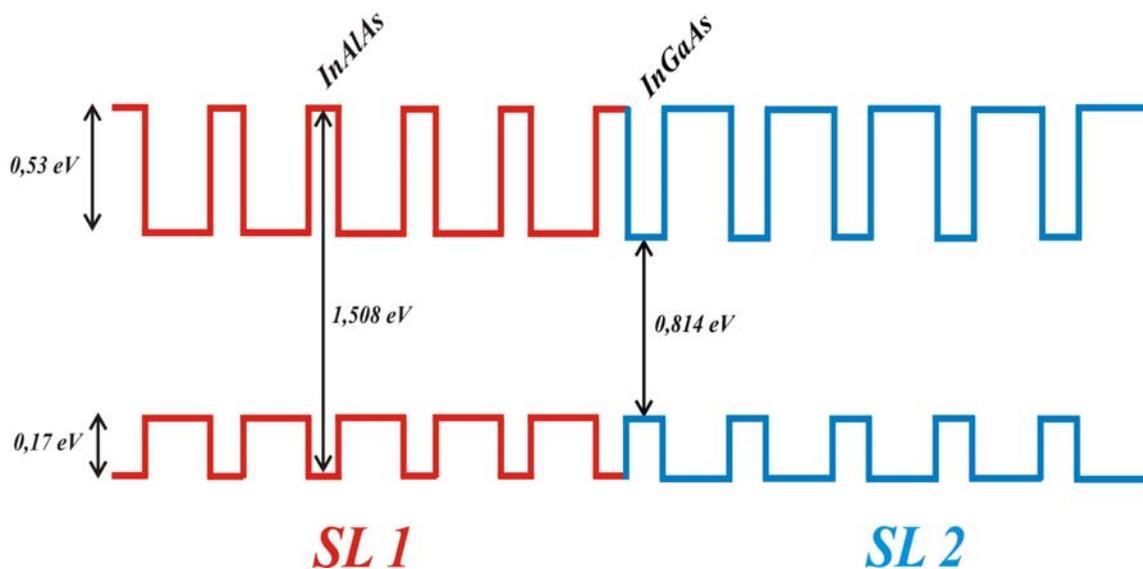


Figura 4.2 - Diagrama esquemático reduzido das bandas de energia da amostra. Ref. [4.1].

4.2 – Identificação dos picos de emissão nos espectros de fotoluminescência

Com o objetivo de identificar os picos de emissão presentes nos espectros de fotoluminescência, inicialmente fizemos medidas com campo magnético nulo. Em energias acima do *gap* do $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ (o material de menor *gap* presente nas super-redes) podemos observar dois picos bem definidos e de maior intensidade, e um conjunto de três picos em energias abaixo deste valor. Um destes espectros pode ser visto na Figura 4.3.

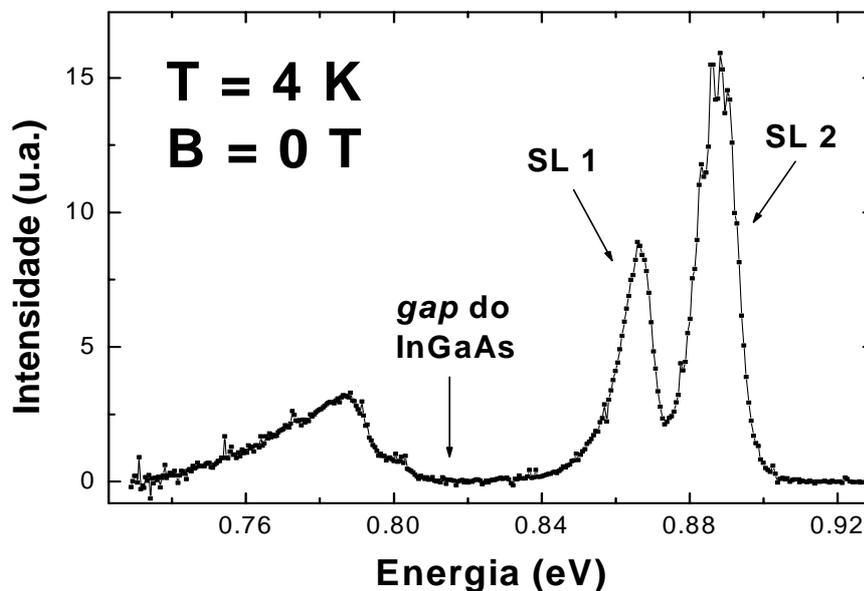


Figura 4.3 - Espectro de fotoluminescência de uma amostra estudada a 4 K com campo magnético nulo.

Os picos acima do *gap* do $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ foram identificados, com o auxílio de cálculos teóricos dos níveis de energia, como sendo as transições fundamentais (e_1 - hh_1) das duas super-redes. Os cálculos dos níveis de energia foram feitos usando a equação (2.3) com a ajuda do estudante de doutorado Weber Harry de Moraes e Feu. As discontinuidades de banda são as mostradas na Figura 4.2 e os valores de massas efetivas usados nos cálculos são mostrados na tabela a seguir:

m_e^{InGaAs}	0,043
m_{hh}^{InGaAs}	0,377
m_e^{InAlAs}	0,086
m_{hh}^{InAlAs}	0,400

Tabela 4.1 – Valores das massas efetivas para o $In_{0,53}Ga_{0,47}As$ (Ref. 4.2) e para o $In_{0,52}Al_{0,48}As$ usados nos cálculos dos níveis de energia. As massas para o $In_{0,52}Al_{0,48}As$ são resultado de uma interpolação com os valores de massas do InAs e do AlAs. Os valores estão em unidades de m_0 , a massa do elétron livre.

Os valores das massas para o $In_{0,52}Al_{0,48}As$ foram obtidos fazendo o seguinte cálculo: $m^{InAlAs} = 0,52m^{InAs} + 0,48m^{AlAs}$, onde foram usados os seguintes dados^[4.2]:

m_e^{InAs}	0,026
m_{hh}^{InAs}	0,333
m_e^{AlAs}	0,15
m_{hh}^{AlAs}	0,472

Tabela 4.2 – Valores de massas efetivas usadas nos cálculos das massas do $In_{0,52}Al_{0,48}As$. Os valores estão em unidades de m_0 , a massa do elétron livre.

Os valores obtidos do cálculo teórico são os seguintes:

	SL 1	SL 2
e1-hh1 (eV)	0,880	0,910

Tabela 4.3 – Valores teóricos para as transições ópticas em ambas as super-redes. Observa-se que a emissão devido a SL 2 deve ocorrer em uma energia maior.

Pelos cálculos, o pico de luminescência em cerca de 0,887 eV tem origem em SL 2 e o outro pico, centrado em 0,866 eV é proveniente de SL 1. A diferença entre os

valores teóricos e experimentais (14 meV para SL 1 e 23 meV para SL 2) é provavelmente devida à diferença entre os valores reais e os valores nominais das espessuras das camadas. Devemos lembrar também que, além de a equação (2.3) ser uma aproximação de uma super-rede infinita, nos cálculos não foi levada em consideração a energia de ligação dos éxcitons, que diminui o valor da energia de transição. Outro fator que confirma essa identificação dos picos das super-redes é a intensidade relativa do sinal de luminescência. Espera-se que o pico originado na super-rede mais externa seja mais intenso, uma vez que o laser usado para excitar a amostra tem que atravessar uma menor quantidade de material para excitar elétrons em SL 2, ou seja, a potência efetiva de excitação é maior nessa super-rede, o que implica em um maior número de recombinações. Também por estar localizada mais próxima à superfície da amostra, a luz por ela emitida, assim como o laser de excitação, deve atravessar uma menor quantidade de material. Conseqüentemente, o sinal de luminescência de SL 2 é mais intenso.

Identificados os picos de emissão em energias maiores que o *gap* do $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$, restaram os três picos em energias abaixo desse valor. Essa parte do trabalho foi feita em colaboração com L. C. Poças, J. L. Duarte e I. F. L. Dias, da Universidade Estadual de Londrina, Paraná. Lá foram feitos estudos detalhados desses picos de menor energia também através de medidas de fotoluminescência^[4.3]. Os picos foram identificados como sendo originados por uma recombinação excitônica e duas recombinações envolvendo impurezas doadoras e aceitadoras na camada de acomodação de InGaAs.

Sendo provenientes de uma camada volumétrica (*bulk*), espera-se, como foi mostrado no Capítulo 2, que esses três picos apresentem um caráter tri-dimensional quando sujeitos a campos magnéticos paralelos e perpendiculares à direção de crescimento (definida como sendo ao longo do “eixo *z*”). Portanto, o comportamento com o campo magnético desses picos não deve depender da orientação do campo em relação à direção de crescimento da amostra.

Na Figura 4.4 apresentamos dois conjuntos de espectros de fotoluminescência obtidos a mesmas temperatura e potência de excitação para alguns valores de campo magnético. Neles, observamos que tanto com o campo perpendicular como paralelo ao eixo *z*, o comportamento deste conjunto de picos é o mesmo, ocorrendo apenas uma diminuição da intensidade do sinal de luminescência. Efeito diferente ocorre com os

picos das super-redes, para os quais observamos um deslocamento para energias maiores com a aplicação do campo paralelo ao eixo z .

Esta observação reforça a conclusão de que esses três picos têm sua origem em transições na camada de acomodação, não sendo relacionados com as super-redes. De agora em diante, não nos reportaremos mais a eles, concentrando nossas medidas e análises nos picos de luminescência provenientes das super-redes.

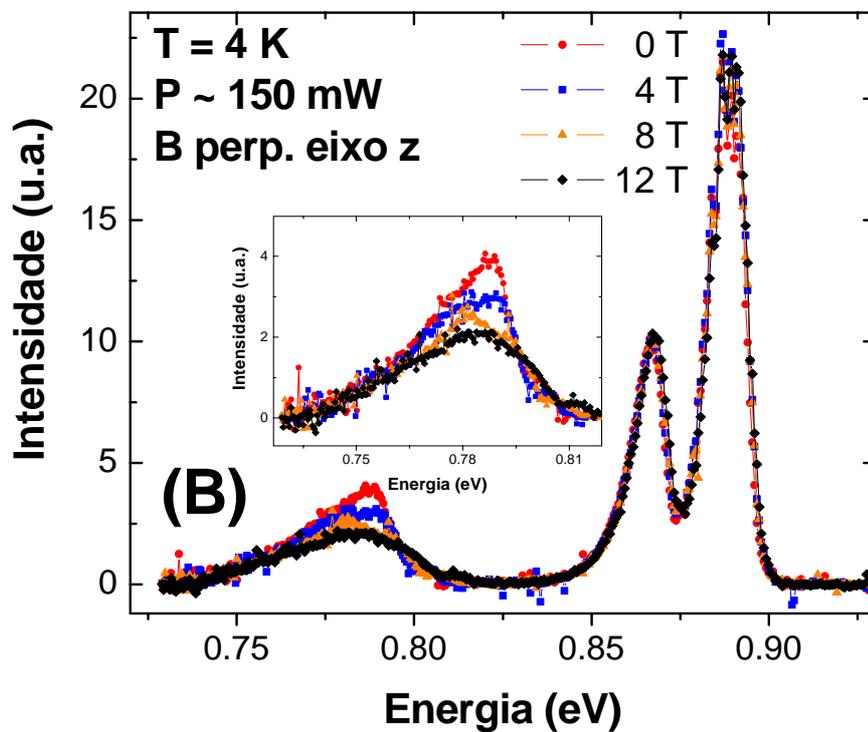
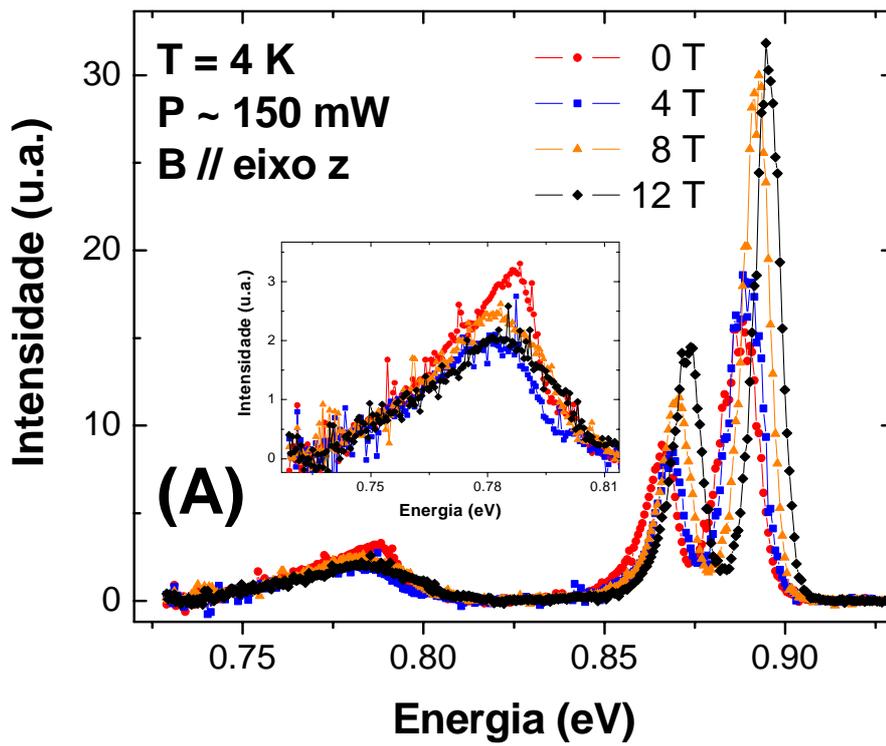


Figura 4.4 - Espectros de fotoluminescência a 4 K com o campo magnético em duas orientações diferentes, paralelo (A) e perpendicular (B) à direção de crescimento da amostra. Em destaque, a região dos três picos abaixo do *gap* do $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$.

4.3 – Medidas com o campo paralelo ao eixo z

Identificados todos os picos presentes nos espectros, nos dedicamos somente ao estudo das duas super-redes. O objetivo é estudar o comportamento dos sinais de luminescência das super-redes em função do campo magnético, aplicado paralelamente à direção de crescimento, variando a temperatura da amostra e procurando, na medida do possível, manter fixa a potência de excitação.

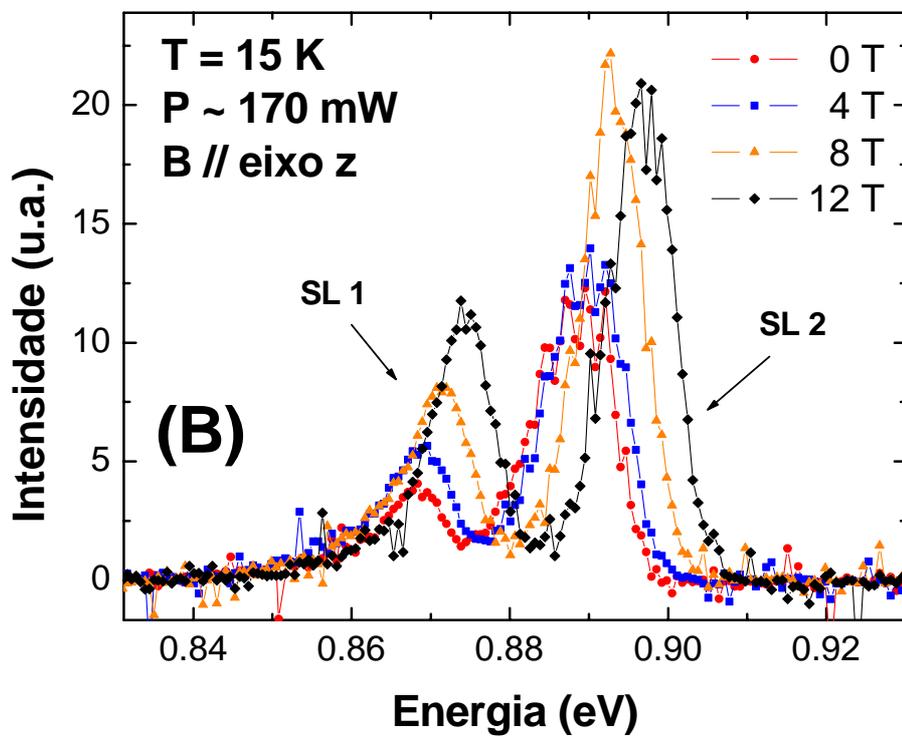
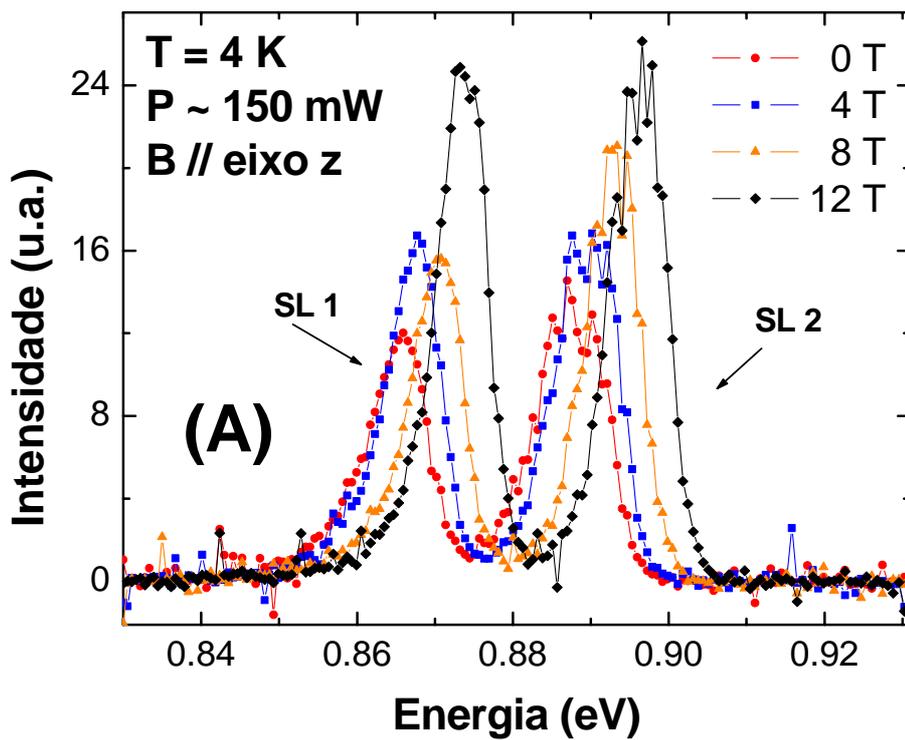
Foram feitas então medidas de magnetofotoluminescência a diferentes temperaturas entre 4 K e 45 K, sempre usando a montagem experimental descrita na Seção 3.2. Alguns dos espectros obtidos são apresentados na Figura 4.5 (A)-(F).

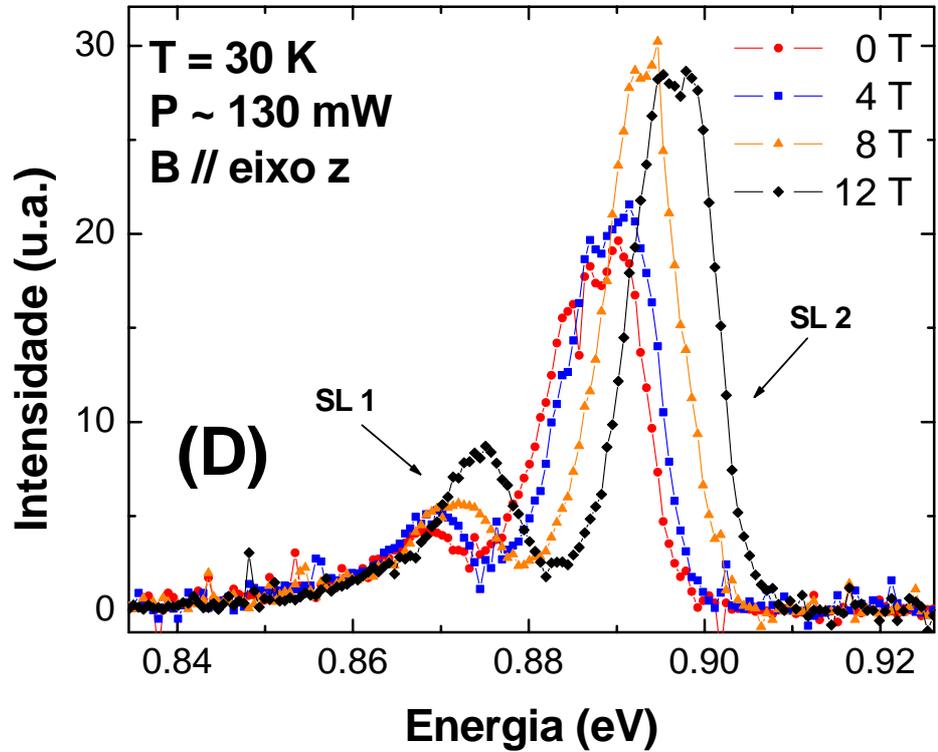
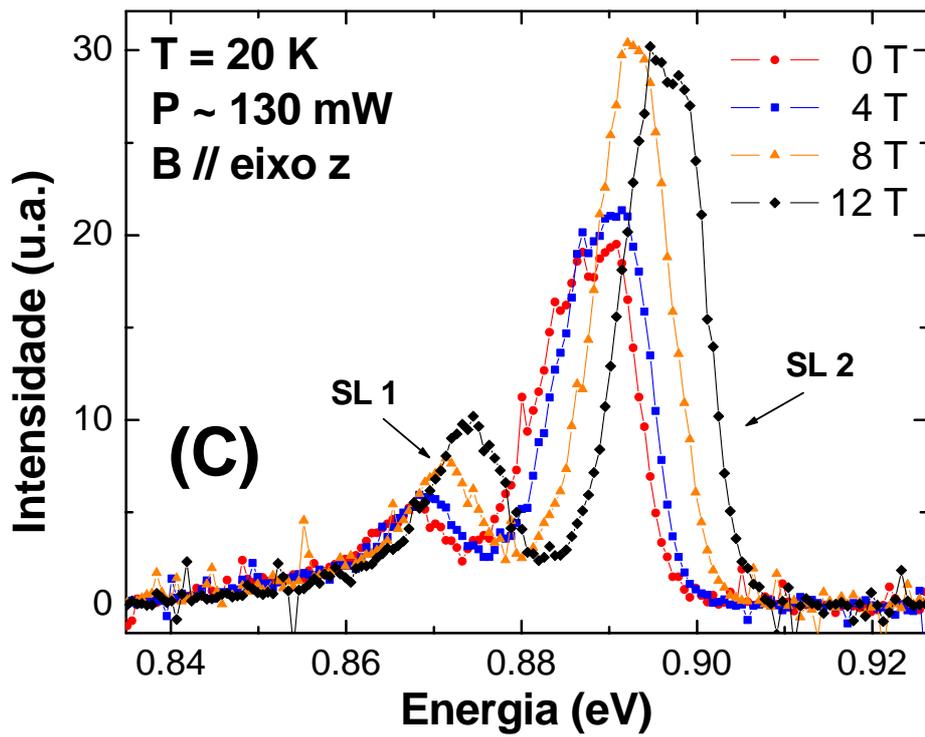
A partir deles, podem ser feitas algumas observações:

- A 4 K os picos de SL 1 e SL 2 têm praticamente a mesma intensidade. A pequena diferença em intensidade entre as super-redes a 4 K pode ser explicada pela baixa agitação térmica na amostra, o que produz um menor espalhamento tanto dos fótons incidentes como dos fótons emitidos por SL 1. Aumentando a temperatura, a diferença em intensidade aumenta significativamente;

- A emissão proveniente de SL 1 só é observada até 30 K. A partir dessa temperatura a agitação térmica é tal que os fótons incidentes podem ser espalhados antes de entrarem em SL 1. Além disso, os fótons emitidos são espalhados ao deixarem a estrutura. Em consequência, somente o sinal de SL 2 é detectado em temperaturas mais altas que 30 K;

- Há um aumento das intensidades das linhas de luminescência com o aumento do campo magnético, devido ao aparecimento do nível de Landau $n_l = 0$. Esse aspecto será tratado com mais detalhes adiante.





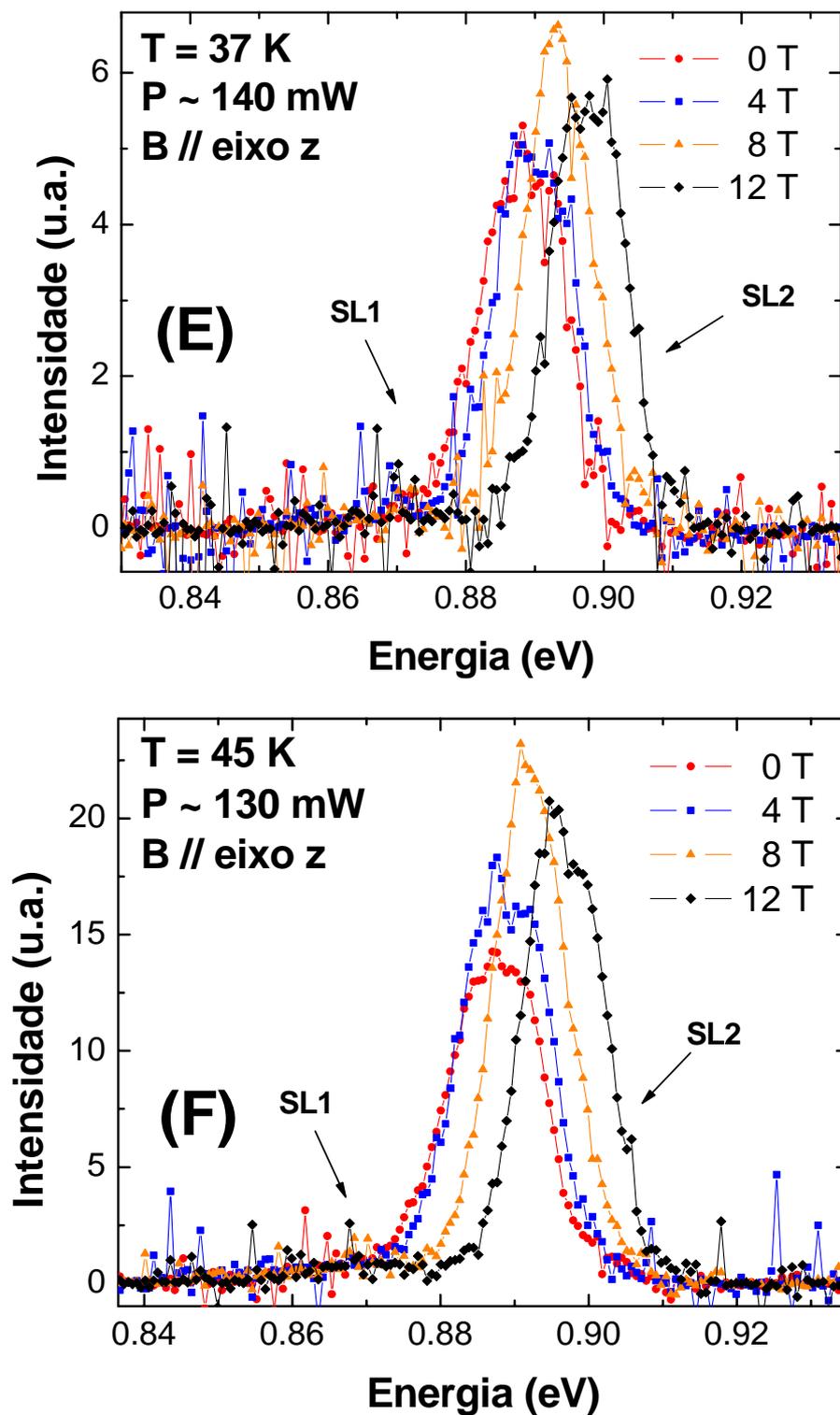


Figura 4.5 – Espectros de fotoluminescência a 4 K (A), 15 K (B), 20 K (C), 30 K (D), 37 K (E) e 45 K (F). Pode-se observar, além do aumento da intensidade dos picos com o aumento do campo magnético, que a 4 K os picos de emissão de SL 1 e SL 2 têm a mesma intensidade, mas logo na temperatura seguinte, 15 K, a emissão de SL 2 é muito mais intensa. A diferença de intensidade aumenta com a temperatura até 30 K, última temperatura em que o pico de emissão de SL1 é observado.

A partir dos espectros obtidos, foi possível observar não só a variação em energia dos picos de emissão com o campo magnético, mas também o comportamento das larguras de linha, das intensidades integradas e das intensidades absolutas dos picos em função do campo magnético. Nos espectros de fotoluminescência, observamos que somente a 4 K os dois picos estão totalmente separados. Para temperaturas maiores, há um longo prolongamento dos picos de fotoluminescência para a região de energias menores, cuja origem pode ser devida a uma provável presença de impurezas e/ou defeitos ou a efeitos de localização dos éxcitons em flutuações do potencial de confinamento. Sendo assim, para temperaturas maiores que 4 K, o pico de SL 1 está sobre o prolongamento de SL 2. Portanto, as determinações da posição, intensidade e largura de linha do pico devido a SL 1 são significativamente afetadas pelo pico de luminescência de SL 2. Em conseqüência, não é seguro tirar nenhuma conclusão para SL 1 a temperaturas maiores que 4 K.

Como ilustração do comportamento das intensidades absolutas, mostramos na Figura 4.6 o gráfico Intensidade vs Campo Magnético para $T = 4$ K. As intensidades foram medidas após uma filtragem numérica (*smooth*) dos espectros experimentais para eliminar principalmente oscilações devido à absorção de água na região do pico de SL 2. Para cada super-rede a intensidade da fotoluminescência aumenta até um certo valor de campo, sendo que para SL 1 a intensidade começa a diminuir a partir de 5 T, voltando a crescer para valores mais altos de campo. Para SL 2, há uma saturação a partir de 7 T. Os saltos nas intensidades das duas super-redes em $B = 10$ T devem-se a prováveis alterações na montagem óptica, ou seja, são devidos a problemas experimentais. O aumento das intensidades em função do aumento do campo magnético pode ser explicado pelo aparecimento de picos na densidade de estados eletrônicos, causados pelo campo magnético, tanto na banda de valência como na banda de condução. Isso faz com que a energia de emissão fique cada vez mais bem definida com o aumento do campo magnético, ou seja, estados com energias próximas à energia de um nível de Landau passam a recombinar com energias cada vez mais próximas desta. Portanto, aumenta o número de elétrons recombinando numa faixa de energia cada vez mais estreita, o que aumenta a probabilidade de recombinações, e por conseqüência, a intensidade dos picos de fotoluminescência.

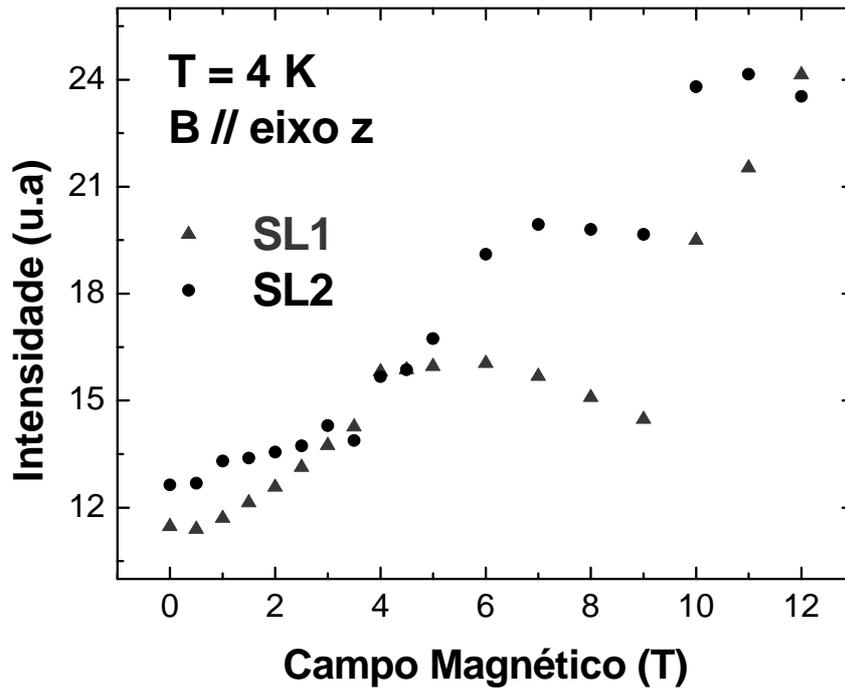


Figura 4.6 – Intensidade absoluta em função do campo magnético para as duas super-redes a 4 K. A intensidade de SL 2 aumenta até 7 T, e a partir desse valor de campo, se mantém constante. Já para o pico de SL 1, a intensidade aumenta até um campo de 5 T e depois começa a diminuir, voltando a crescer em seguida. Os saltos em B = 10 T são devidos a alterações na montagem óptica.

Para a determinação das larguras dos picos, foram feitos ajustes separados de curvas gaussianas nos espectros filtrados numericamente (*smooth*). Um desses ajustes é mostrado abaixo.

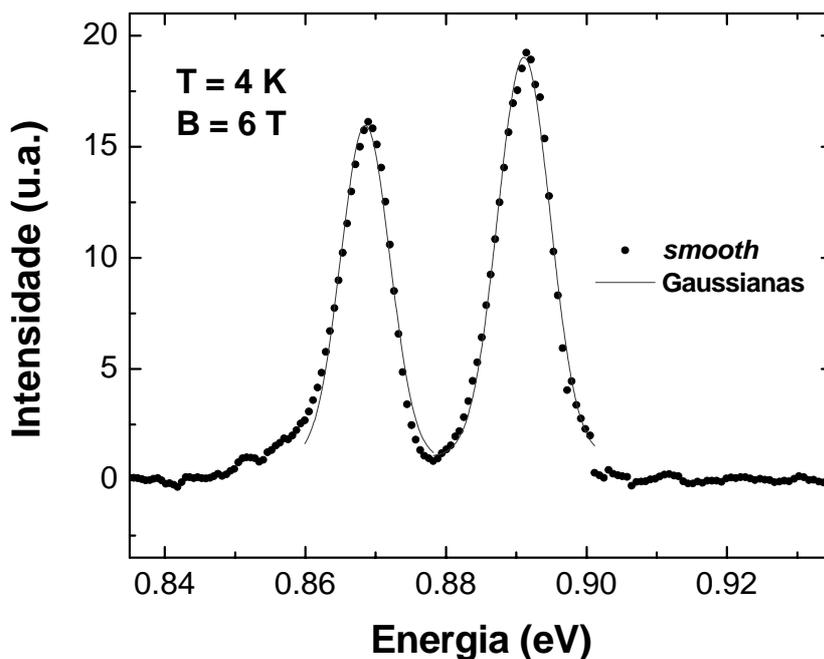


Figura 4.7 – Ajustes de curvas gaussianas ao espectro de fotoluminescência a 4 K e 6 T. A curva de fotoluminescência foi previamente filtrada numericamente, para diminuir o nível de ruído.

Em relação às larguras de linha, observamos um comportamento semelhante para as duas super-redes. Há uma diminuição nos valores da largura até um campo magnético de cerca de 8 T, a partir do qual, dentro do erro experimental, a largura se mantém constante para SL 1 e há um aumento para SL 2, cuja causa é desconhecida. A explicação para a diminuição das larguras à meia altura é a mesma para o aumento das intensidades absolutas: o aparecimento de picos na densidade de estados eletrônicos, que fazem a energia de emissão ficar cada vez mais bem definida. Com isso, os picos de fotoluminescência ficam mais finos à medida que o campo magnético aumenta.

Na Figuras 4.8 e 4.9 são mostrados os gráficos das larguras de linha em função do campo magnético a 4 K para as duas super-redes. Os valores de largura à meia altura usados nos gráficos foram tirados dos ajustes como o mostrado na Figura 4.7.

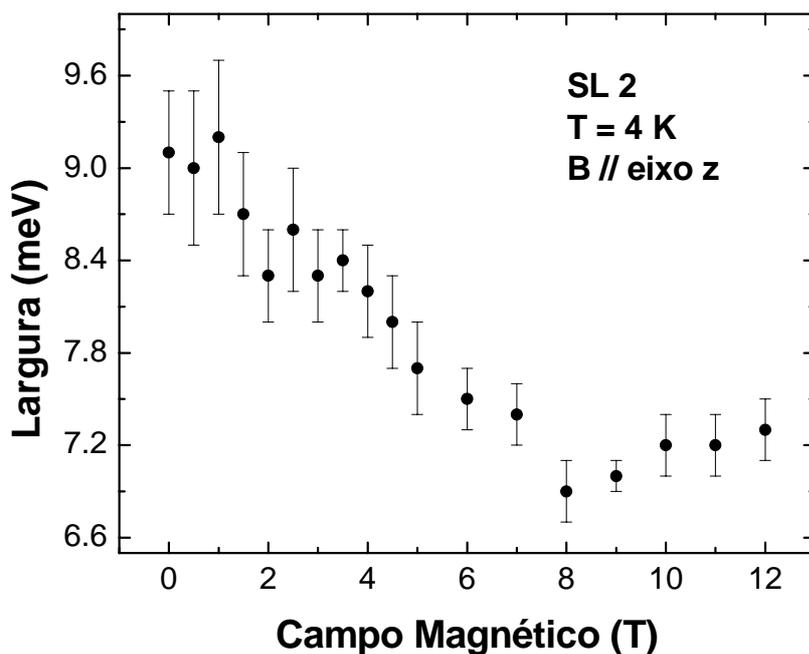


Figura 4.8 – Largura de linha em função do campo magnético para SL 2 a 4 K. Observa-se que a largura diminui devido ao aparecimento picos na densidade de estados eletrônicos (níveis de Landau), até atingir um mínimo em 8 T, seguido de um aparente crescimento cuja causa não é clara.

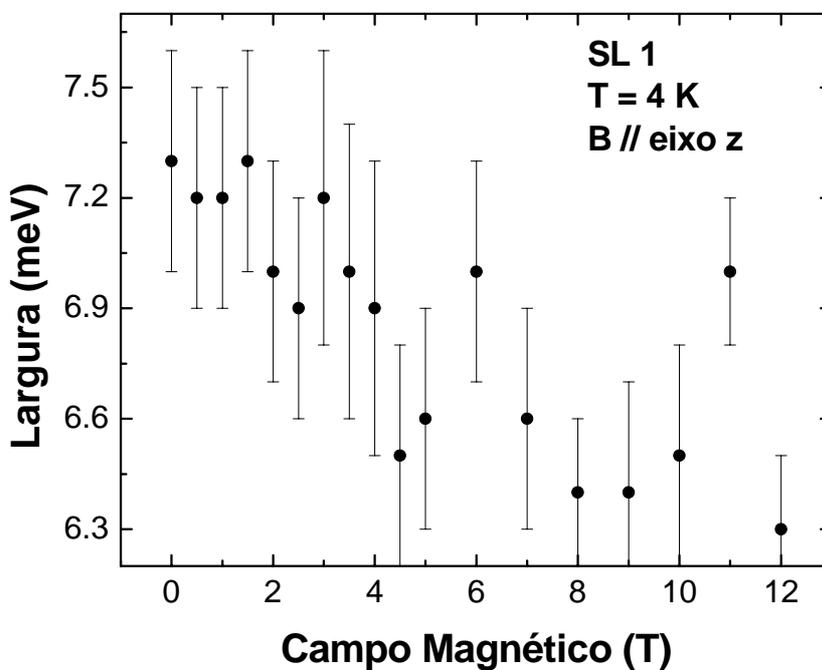


Figura 4.9 – Largura à meia altura dos picos de fotoluminescência em função do campo magnético aplicado para SL 1 a 4 K. A largura diminui até aproximadamente 5 T e permanece constante para altos campos magnéticos.

Para verificar com maior precisão o comportamento da probabilidade de recombinação com o campo magnético, é melhor usar não a intensidade absoluta, mas sim a intensidade integrada dos picos de fotoluminescência. Na Figura 4.10 são mostrados os gráficos da intensidade integrada em função do campo magnético para as duas super-redes a 4 K.

Uma vez que a intensidade integrada é proporcional à área sob os picos, seu aumento significa que a intensidade absoluta aumenta mais rapidamente que a largura diminui. Tal comportamento é observado até $B = 7$ T, havendo uma pequena diminuição logo em seguida, cuja origem é desconhecida. Para $B \geq 10$ T, não é possível fazer qualquer afirmação para ambas as super-redes em virtude do salto na intensidade absoluta.

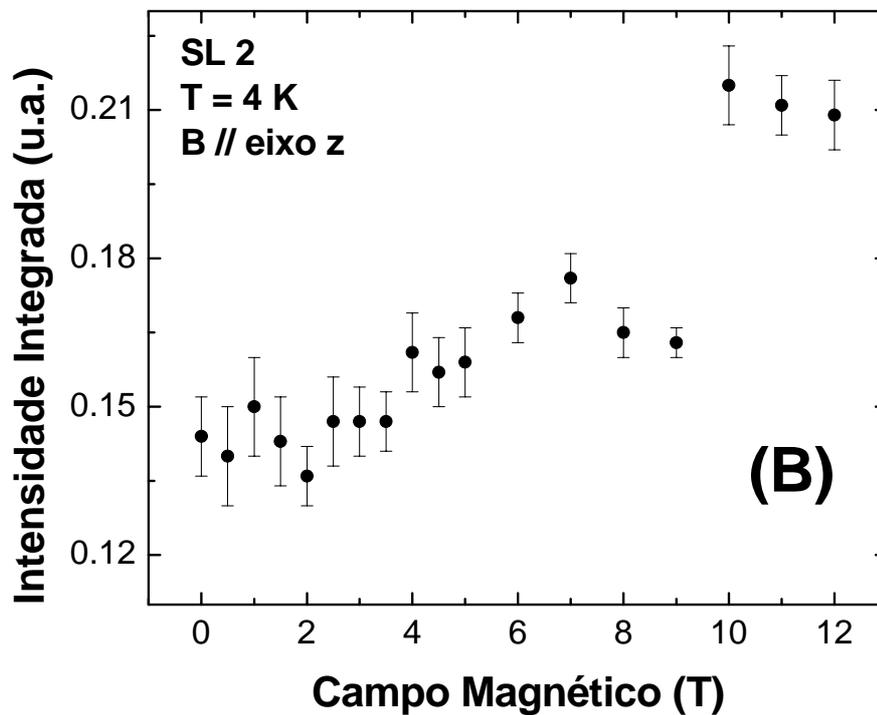
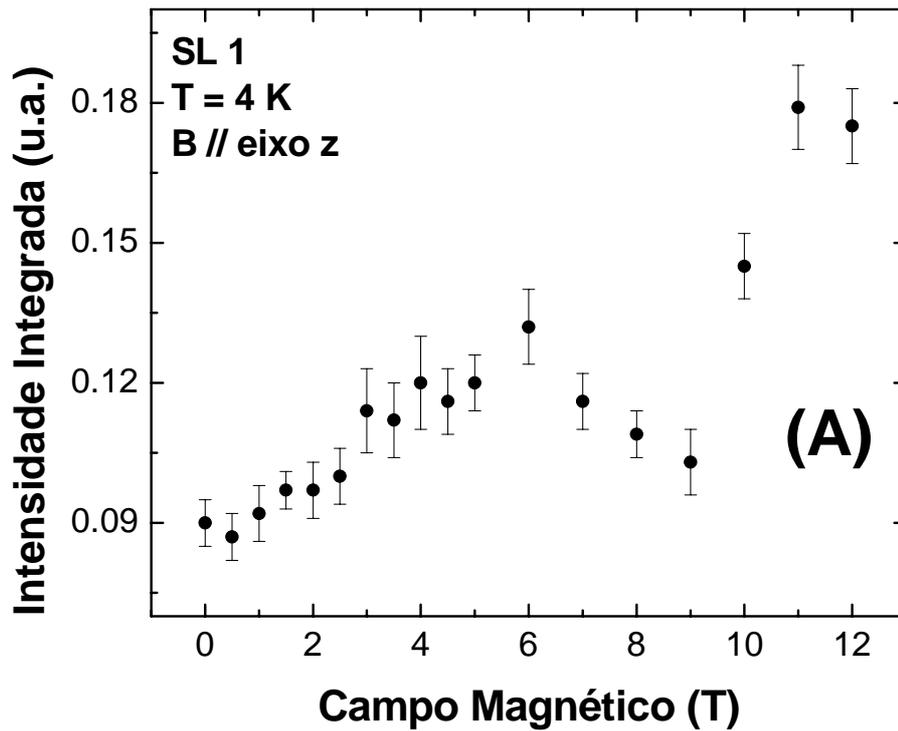


Figura 4.10 – Intensidade integrada em função do campo magnético para SL 1 (A) e SL 2 (B). A intensidade integrada aumenta com o campo para ambas as estruturas até $B = 7$ T quando sofre uma pequena diminuição. Para $B \geq 10$ T, não podemos fazer qualquer afirmação, em virtude do salto ocorrido nas intensidades absolutas.

4.4 – Dimensionalidade, energia de ligação e massas dos éxcitons nas super-redes

Já tendo conhecimento de como as intensidades (absoluta e integrada) e as larguras de linha dos picos de fotoluminescência variam com o campo magnético, vamos agora estudar o comportamento das energias de emissão.

Observando os gráficos da posição em energia dos picos de fotoluminescência em função do campo magnético, constatamos que tais picos apresentam, em todas as temperaturas, um comportamento não linear em \mathbf{B} , o que está de acordo com o modelo teórico proposto no Capítulo 2 para éxcitons em semicondutores. Podemos então dividir cada gráfico em duas regiões: uma para valores mais baixos de campo, em que a energia da transição óptica observada é proporcional ao deslocamento diamagnético (proporcional a B^2) e uma outra para campos altos, onde há o aparecimento de níveis de Landau e uma contribuição da energia de ligação dos éxcitons, com variação do tipo $B^{1/2}$.

De maneira geral, a energia de recombinação entre um elétron num estado na banda de condução e um buraco na banda de valência das super-redes com a aplicação de um campo magnético pode ser escrita da seguinte forma:

$$E = E_g + E_e + E_{hh} + E(B), \quad (4.1)$$

onde E_g é a faixa de energia proibida (*gap*) do material do poço, E_e é a energia do nível de elétrons na banda de condução, E_{hh} é a energia do nível de buracos pesados na banda de valência e $E(B)$ é um termo dependente do campo magnético, tendo uma expressão para cada um dos dois regimes de valores de campo magnético.

Para termos uma idéia da região onde ocorre a mudança do regime de campos baixos para o de campos altos, podemos olhar para a razão^[4.4] entre a separação dos níveis de Landau e a ordem de grandeza da energia do éxciton

$$\gamma = \frac{(1/2)\hbar\omega_c}{R_y^*}. \quad (4.2)$$

Quando γ é próximo de 1, estamos na região dos valores de \mathbf{B} para os quais essa transição ocorre. O cálculo da razão acima é feito usando as expressões para a frequência de ciclotron e para a constante de Rydberg, dadas no Capítulo 2.

Neste momento, devemos observar que neste trabalho foi usada a aproximação parabólica, ou seja, consideramos a massa efetiva um escalar.

No regime de baixos campos, o termo $E(B)$ em (4.1) é o deslocamento diamagnético ($\propto B^2$), dado pela equação (2.30), reduzido pela energia de ligação dos éxcitons a campo nulo, $E_x(0)$. Sendo assim, para a região de campos baixos a equação (4.1) é escrita como:

$$E = E_g + E_e + E_{hh} - E_x(0) + \frac{aD_1}{(\mu^*)^3} B^2, \quad (4.3)$$

onde a constante a é:

$$a = \frac{\epsilon_0^2 \epsilon_r^2 h^4}{4\pi^2 e^2 m_0^3} = 2,39 \times 10^{-8} \text{ eV/T}^2, \quad (4.4)$$

sendo $\epsilon_r = 13,9$ a constante dielétrica do $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ ^[4.5-4.6]. D_1 é um parâmetro que indica a dimensionalidade dos éxcitons nos poços, tomando valores entre 3/16 (perfeitamente bidimensional) e 1 (caso perfeitamente tridimensional)^[4.7].

Para o regime de campos magnéticos intensos, o termo dependente de B em (4.1) é a energia dos níveis de Landau reduzida pela energia de ligação dos éxcitons em função do campo magnético, $E_x(B)$, dada pela equação (2.30), derivada teoricamente por Akimoto e Hasegawa^[4.8] para campos magnéticos intensos e comprovada experimentalmente por Rogers^[4.9] *et al.* para heteroestruturas de GaAs/AlGaAs.

Sendo assim, a transição óptica observada em campos magnéticos intensos pode ser escrita da seguinte forma:

$$E = E_g + E_e + E_{hh} + kB - D_2 b B^{1/2}, \quad (4.5)$$

onde $k = (n_l + 1/2)\hbar e / \mu^*$ é a constante que fornece os níveis de Landau para o par elétron-buraco, uma vez que já está escrita em termos da massa reduzida efetiva. Em nosso experimento, observamos somente o nível de Landau fundamental, $n_l = 0$. A constante b , do termo proporcional a $B^{1/2}$, é dada pela equação (2.31). Para o nível de Landau $n_l = 0$, seu valor é

$$b = 3 \left(\frac{e^5}{128\pi^3 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2 \hbar^2 c} \right)^{1/2} = 6,07 \times 10^{-3} \text{ eV/T}^{1/2} \quad (4.6)$$

O parâmetro D_2 , assim como D_1 , indica a dimensionalidade dos éxcitons nos poços, tomando valores entre 1 (bidimensional) e 0,25 (tridimensional)^[4.9].

Para fazer ajustes aos dados experimentais, usamos curvas do tipo $E = F + \frac{aD_1}{(\mu^*)^3} B^2$ para o regime de campos baixos e $E = G + \frac{\hbar e}{2\mu^*} B - bD_2 B^{1/2}$ para o regime de campos intensos, onde F e G são constantes. Como cada curva depende de dois parâmetros (μ^* e D_1 para campos baixos e μ^* e D_2 para campos intensos), mais de uma curva se ajusta bem aos pontos experimentais para cada regime, dependendo do valor de \mathbf{B} usado como máximo para o regime de campos baixos e do valor mínimo para o regime de campos intensos. Tal escolha implica em diferentes pares de valores D_1 - D_2 para um mesmo valor de massa reduzida efetiva. Na Figura 4.11 são mostrados dois ajustes obtidos variando-se os valores limite de \mathbf{B} em cada regime para SL 2 a 4 K.

A tabela 4.4 mostra os parâmetros de dimensionalidade obtidos a partir de dois ajustes diferentes e usando dois valores diferentes de massa efetiva reduzida. Os ajustes resultantes são mostrados na Figura 4.11.

	μ^*	D_1	D_2
<i>Ajuste 1</i>	0,039 m_0	0,29	0,65
<i>Ajuste 2</i>	0,053 m_0	0,98	0,27

Tabela 4.4 – Parâmetros obtidos a partir dos ajustes mostrados na Figura 4.11.

Portanto, temos ajustes razoáveis para os nossos pontos experimentais para mais de um conjunto de parâmetros.

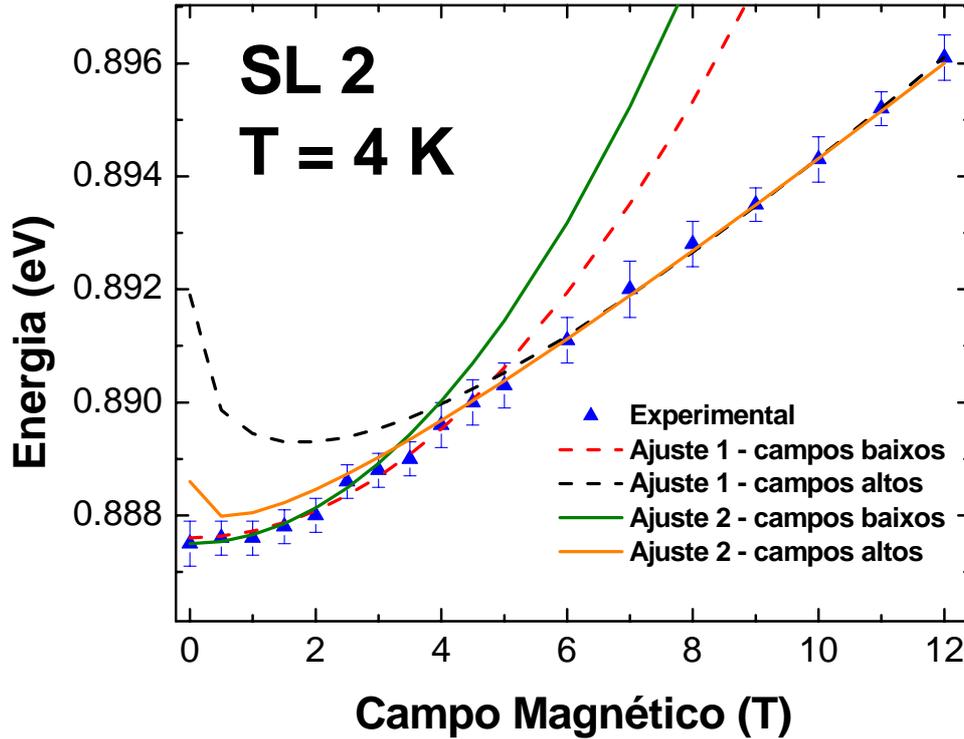


Figura 4.11 – Dois ajustes diferentes, a campos baixos e campos altos, para SL 2 a 4 K. Os parâmetros obtidos são mostrados na Tabela 4.4. Observa-se que diferentes valores limite de B geram curvas que se ajustam bem aos dados experimentais.

Uma vez que na literatura existe uma grande dispersão nos valores propostos para as massas efetivas de elétrons e buracos no $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$, que levam a massas reduzidas na faixa entre $0,03 m_0$ e $0,06 m_0$ [4.2, 4.5, 4.6, 4.10], não temos um melhor valor para usar na determinação de D_1 e D_2 a partir dos ajustes. O procedimento então será determinar o melhor valor para a massa reduzida. Para tanto, será usado um cálculo autoconsistente, cujo diagrama esquemático é mostrado na Figura 4.12 e descrito a seguir.

Escolhemos arbitrariamente um valor inicial $\mu_{n=0}^* = 0,039 m_0$ (na faixa de $0,03 m_0$ a $0,06 m_0$). Por se tratar de um cálculo autoconsistente, qualquer outro valor inicial poderia ser usado. Com esse valor, foram feitos vários ajustes na região de campos altos, começando a partir de diferentes campos, uma vez que não sabemos em que valor de B começa esse regime. A escolha do regime de campos intensos para começar o cálculo foi devido à menor influência do valor de μ^* nessa região de valores de campos magnéticos. Determinamos então um valor médio inicial para D_2 .

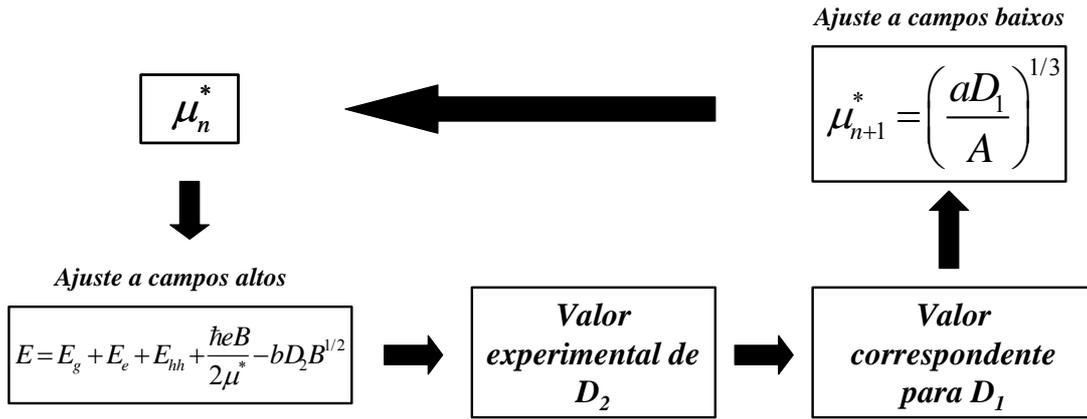


Figura 4.52 – Diagrama esquemático do cálculo autoconsistente feito para determinar as massas efetivas reduzidas dos éxitons nas super-redes.

Para os parâmetros D_1 e D_2 temos apenas os seus valores limite, não conhecendo nada sobre como eles variam de um extremo ao outro. Supomos então que tanto D_1 como D_2 têm uma dependência linear com um certo parâmetro x que varia entre 0 e 1, sendo $x=0$ para bidimensional e $x=1$ para tridimensional, como mostrado na Figura 4.13. Observa-se que para um dado valor de x , há um único valor correspondente para D_1 e outro para D_2 . Na equação abaixo são mostradas as relações entre D_1 , D_2 e x .

$$\begin{aligned} D_1(x) &= D_1^{2D} + x(D_1^{3D} - D_1^{2D}) \\ D_2(x) &= D_2^{2D} - x(D_2^{2D} - D_2^{3D}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Sendo assim, a partir de um valor determinado experimentalmente para D_2 temos um correspondente para D_1 . Como não sabemos até que valor de \mathbf{B} vai o regime de campos baixos, para cada temperatura fizemos vários ajustes quadráticos. Para cada um, temos um valor de

$$A = \frac{a D_1}{(\mu^*)^3}, \quad (4.8)$$

que é a concavidade da parábola, a partir do qual determinamos um novo valor μ_{n+1}^* . O processo foi repetido até que o valor de massa convergisse, ou seja, que tivéssemos $\mu_{n+1}^* = \mu_n^*$ dentro da precisão desejada, e sob a condição que D_1 e D_2 permanecessem dentro dos seus limites (entre 2D e 3D). Para todas as temperaturas, nos casos em que D_1 e D_2 permaneceram válidos, a convergência foi atingida com um máximo de 6 iterações. Essa convergência é única, no sentido de que se partimos de uma massa efetiva inicial diferente, o valor de massa final é sempre o mesmo.

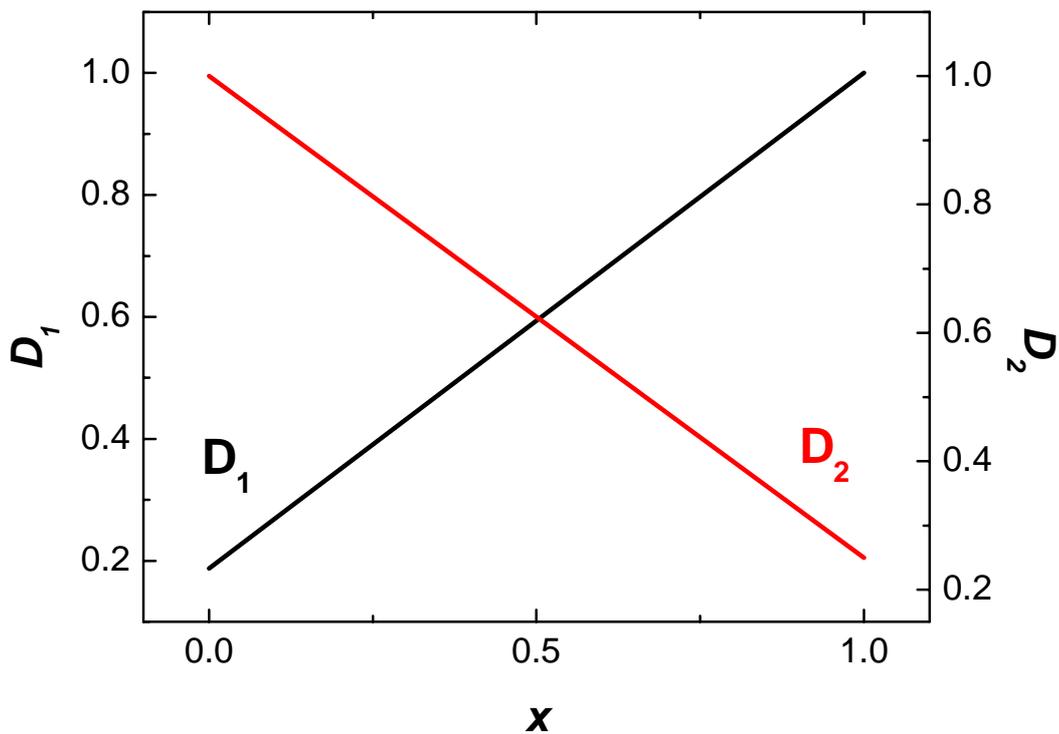


Figura 4.13 – Variação estimada de D_1 e D_2 em função de um parâmetro arbitrário x , a partir do qual pode-se estabelecer uma relação entre os valores de dimensionalidade. Com isso, é possível, através dos valores determinados experimentalmente para D_2 , achar os valores de D_1 correspondentes, que serão usados na determinação das massas efetivas para as diferentes temperaturas medidas.

Para as temperaturas menores que 30 K, obtivemos valores de μ^* que convergiram dentro dos critérios estabelecidos, mantendo D_1 e D_2 dentro dos seus limites. Já para $T \geq 30$ K, não é possível obter a convergência na massa mantendo simultaneamente os valores de dimensionalidade entre os limites correspondentes a 2D

e 3D. Esse resultado indica que esse cálculo não se aplica nessas temperaturas. Fazendo um ajuste somente com a parte linear (apenas o termo do nível de Landau na expressão para a variação da energia da transição óptica com o campo magnético) para a região de campos altos, os valores encontrados para a massa efetiva reduzida para 37 K e 45 K estão na mesma faixa dos valores encontrados para $T < 30$ K, indicando que para as temperaturas mais altas a energia de ligação dos éxcitons não deve ser considerada, ou seja, não há o termo em $B^{1/2}$ na equação (4.5). A 30 K o ajuste linear resultou em um valor muito alto de massa efetiva reduzida, o que leva à conclusão de que para essa temperatura não é possível determinar μ^* .

Os valores encontrados para a massa efetiva reduzida são mostrados no gráfico a seguir:

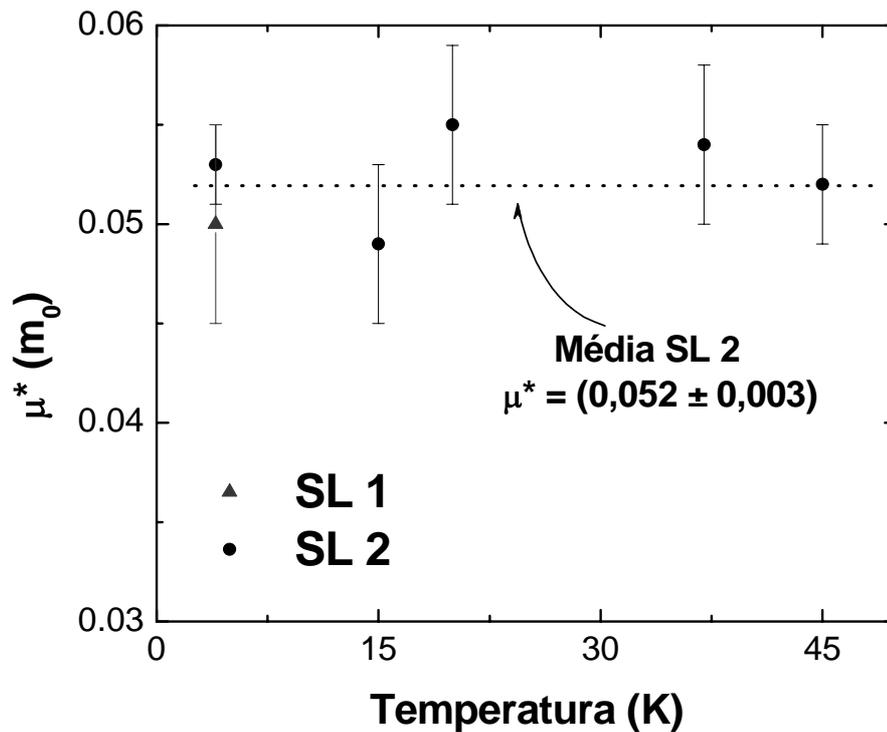


Figura 4.14 - Valores da massa efetiva reduzida para o par elétron-buraco nos poços de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ em função da temperatura para SL 2 e a 4 K para SL 1. Os valores para $T < 30$ K foram obtidos através de cálculos autoconsistentes, usando os ajustes a baixos e altos campos e a relação entre D_1 e D_2 mostrada na Figura 4.13. Já os valores em $T > 30$ K foram obtidos de ajustes lineares a campos altos. A escala vertical corresponde à faixa de valores de μ^* propostos na literatura.

A indeterminação da massa efetiva reduzida a 30 K pode ser entendida calculando a energia de ligação dos éxcitons, $E_x(0)$, para $T < 30$ K através da equação (2.32):

$$E_x(0) = 4R_y^* D_2. \quad (4.9)$$

Uma vez que temos valores convergentes de μ^* , temos também valores finais para D_2 . Com isso, as energias de ligação dos éxcitons em SL 2 são as seguintes:

<i>Temperatura (K)</i>	<i>E_x (meV)</i>
4	$(4,1 \pm 0,5)$
15	$(3,9 \pm 0,3)$
20	$(2,7 \pm 0,3)$

Tabela 4.4 – Valores da energia de ligação dos éxcitons para $B = 0$ T em SL 2 obtidos a partir dos valores finais de D_2 .

Para SL 1 a 4 K, o valor encontrado foi $(5,6 \pm 0,1)$ meV.

A energia térmica, $E_T = K_B T$ (onde K_B é a constante de Boltzman), é da ordem de 3 meV a 30 K. Portanto, 30 K é um valor de temperatura localizado numa faixa de transição, em que a ligação do par elétron-buraco esta sendo quebrada. Por isso, com nenhum dos dois procedimentos, com $B^{1/2}$ ou só com o nível de Landau, foi possível determinar a massa efetiva reduzida do par elétron-buraco a essa temperatura.

Nas Figuras 4.15 – 4.19 são mostrados gráficos com os pontos experimentais e as curvas traçadas usando os valores finais de massa e dimensionalidade para as duas super-redes. O gráfico a 30 K não é mostrado uma vez que não foi possível determinar μ^* para essa temperatura.

Para as temperaturas mais altas, 37 K e 45 K, só temos o parâmetro de dimensionalidade D_1 , uma vez que para campos magnéticos altos foram feitos ajustes lineares. A dimensionalidade foi então obtida de uma maneira diferente: para cada temperatura foram traçadas várias parábolas, de modo a ter uma concavidade média A.

Usando o valor médio de μ^* obtido através de vários ajustes lineares e a equação (4.8), encontramos então os valores de dimensionalidade.

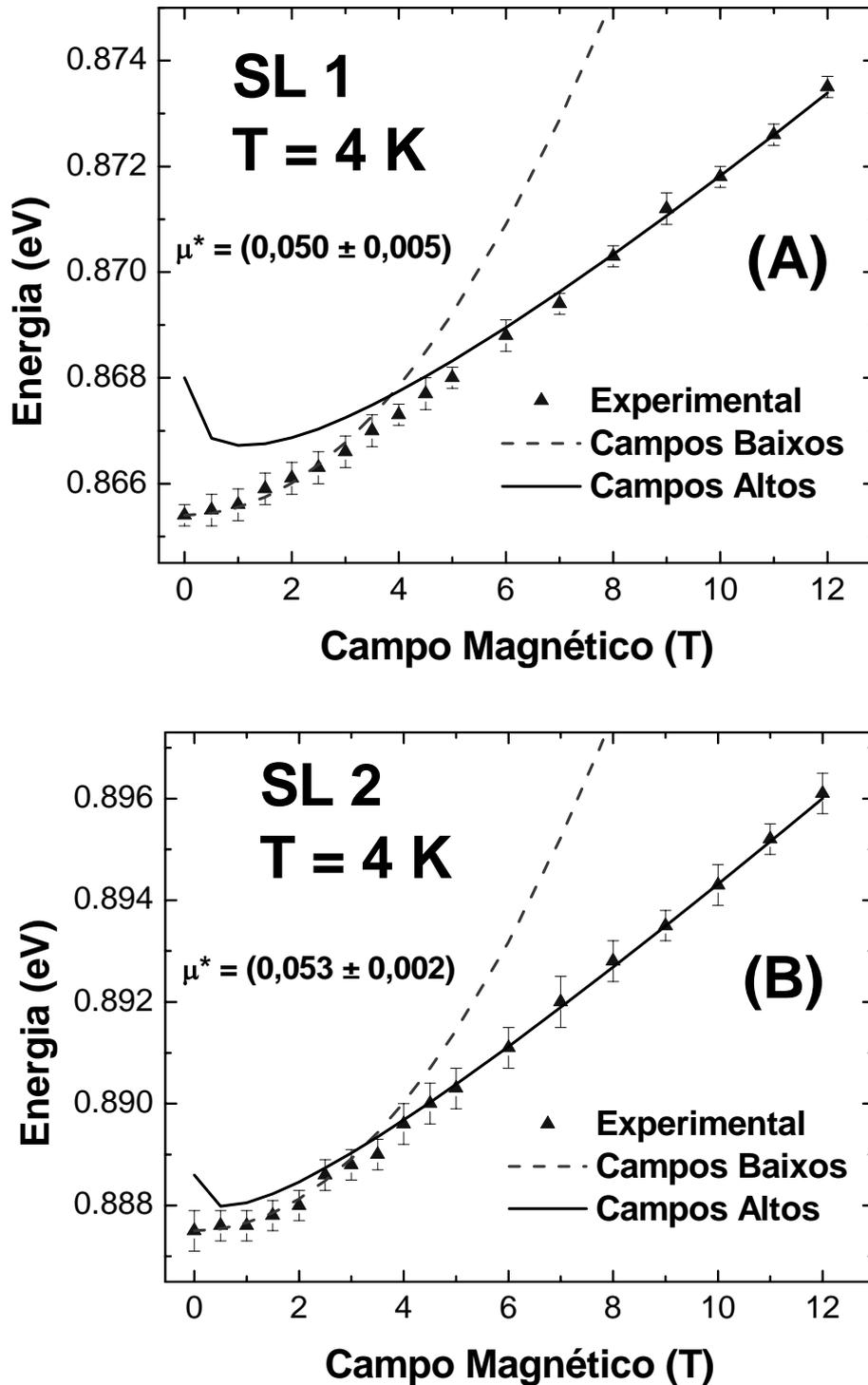


Figura 4.15 – Posição em energia dos picos de fotoluminescência em função do campo magnético, a 4 K com as curvas obtidas a baixos e altos campos usando os valores finais de massa e dimensionalidade para SL 1 (A) e SL 2 (B). Observa-se que dentro do erro, a massa efetiva reduzida é a mesma para as duas super-redes.

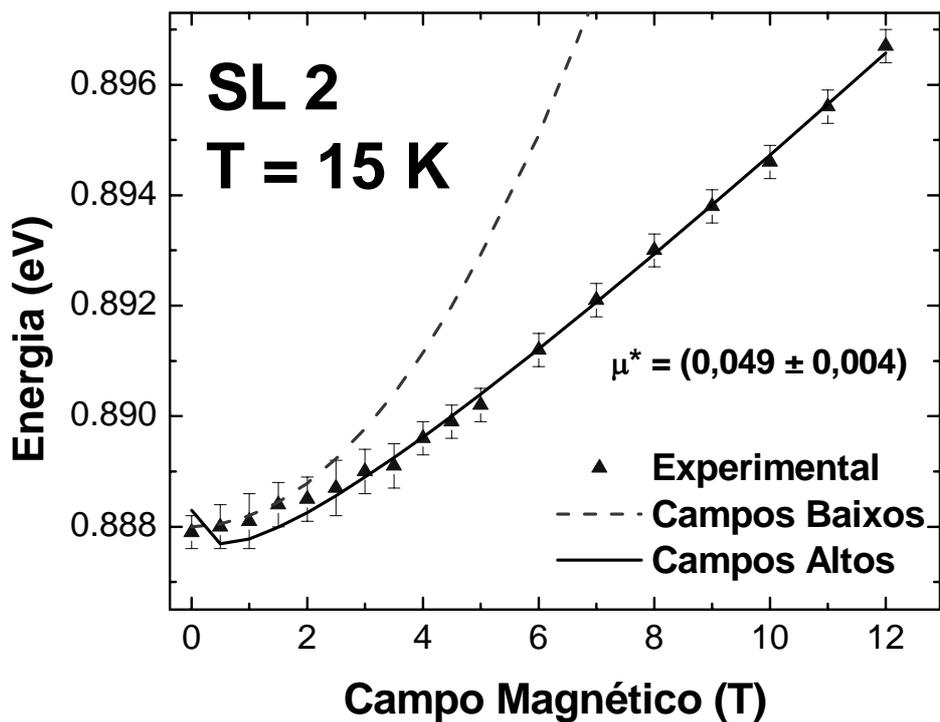


Figura 4.16 - Posição em energia do pico de fotoluminescência de SL 2 em função do campo magnético a 15 K, com as curvas obtidas a baixos e altos campos usando os valores finais de massa e dimensionalidade.

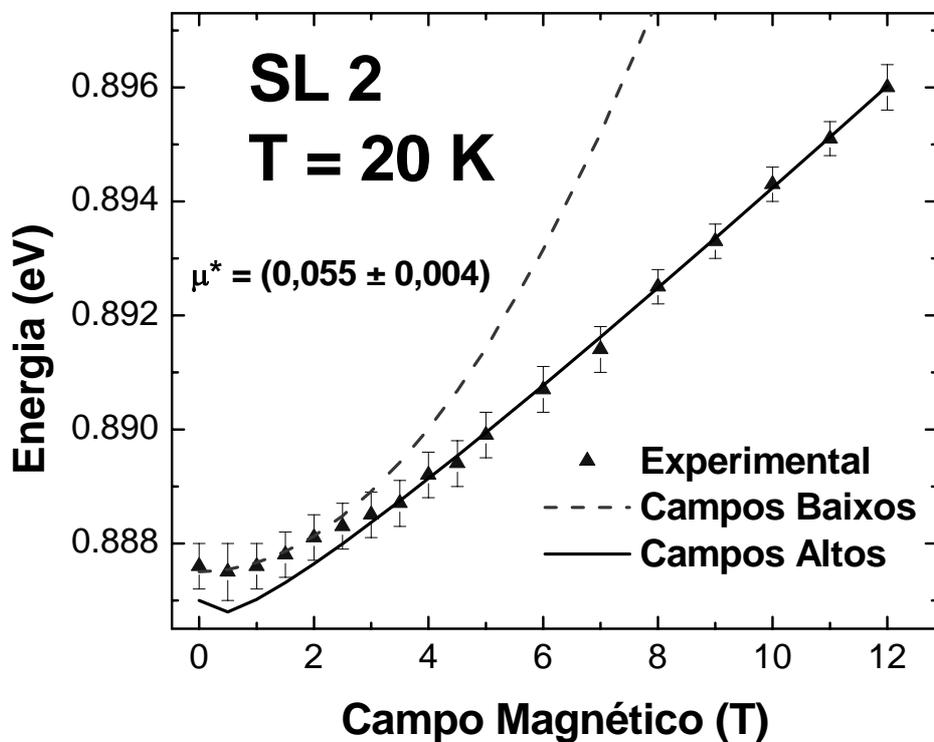


Figura 4.17 - Posição em energia do pico de fotoluminescência de SL 2 em função do campo magnético a 20 K com as curvas obtidas a baixos e altos campos usando os valores finais de massa e dimensionalidade.

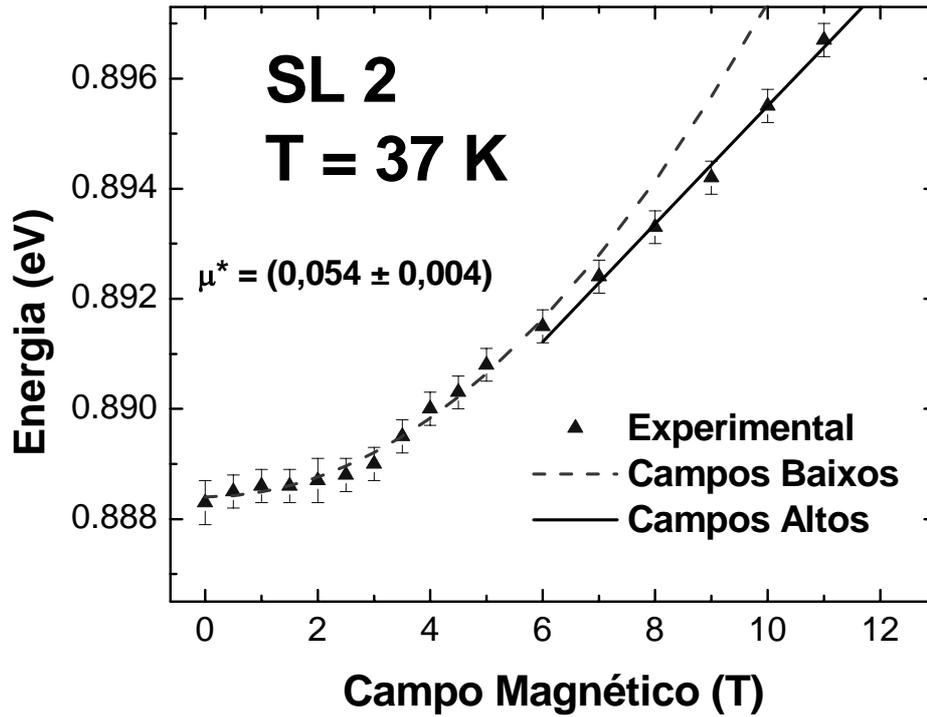


Figura 4.18 - Posição em energia do pico de fotoluminescência de SL 2 em função do campo magnético a 37 K, com a curva obtida a baixos campos usando os valores finais de massa e dimensionalidade e a curva média de vários ajustes lineares a altos campos.

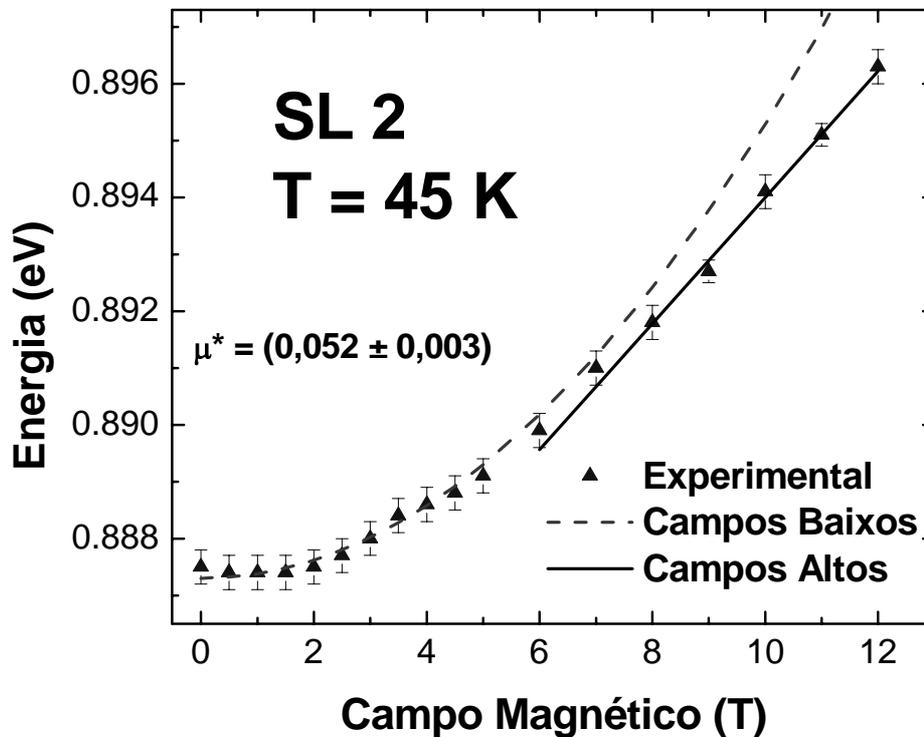


Figura 4.19 - Posição em energia do pico de fotoluminescência de SL 2 em função do campo magnético a 45 K, com a curva obtida a baixos campos usando os valores finais de massa e dimensionalidade e a curva média de vários ajustes lineares a altos campos.

Os valores de dimensionalidade encontrados indicam que os éxcitons na super-rede SL 2 apresentam um forte caráter tridimensional, o que é verificado comparando as energias de ligação na ausência de campo magnético com os valores teóricos obtidos a partir a equação (2.29).

Outro aspecto a ser observado é que a energia de ligação dos éxcitons diminui com o aumento da temperatura, o que é coerente, pois a energia diminui até não poder ser mais determinada justamente na faixa de temperaturas em que $K_B T$ fica da ordem de $E_x(0)$.

Para a única temperatura em que SL 1 pôde ser analisada, os valores da dimensionalidade e da energia de ligação para os éxcitons também indicam um caráter 3D nessa estrutura, mesmo não sendo tão forte quanto em SL 2.

Uma última observação é que, a partir dos valores finais de D_2 , podemos saber como a energia de ligação dos éxcitons varia com o campo magnético, usando as equações (2.31) e (2.32) combinadas:

$$E_x(B) = 4R_y^* D_2 + 3R_y^* \left[\frac{\hbar e}{2(2n_l + 1)\mu^* R_y^*} \right]^{1/2} D_2 B^{1/2}, \quad (4.10)$$

onde a constante de Rydberg, dada também no Capítulo 2. Deve-se lembrar que observamos somente o nível de Landau fundamental, $n_l = 0$. A seguir são mostrados alguns gráficos de $E_x(B)$ vs \mathbf{B} .

Verifica-se que com o aumento da temperatura, a diferença $\Delta E_x = E_x(B = 12 \text{ T}) - E_x(B = 0 \text{ T})$ diminui de 6 meV a 4 K para 3 meV a 20 K para SL 2. A causa dessa redução está no fato de os éxcitons ficarem menos ligados, ou seja, eles sentem menos o efeito do campo magnético.

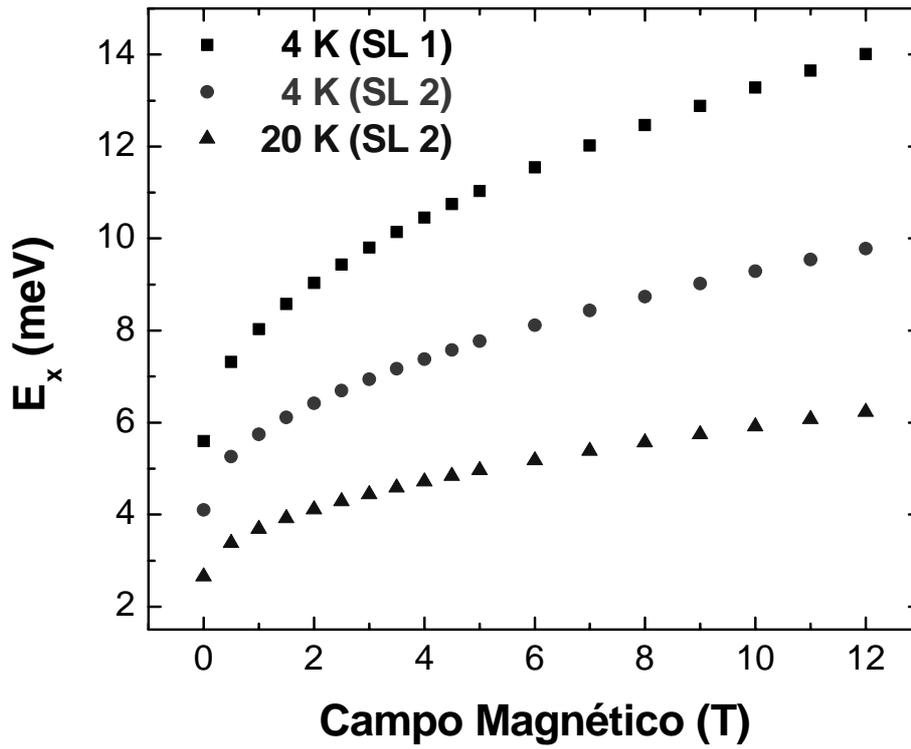


Figura 4.20 – Energia de ligação dos éxcitons em função do campo magnético, dada pela equação (4.10) e usando os valores finais do parâmetro D_2 e da massa efetiva reduzida para as duas super-redes. Observa-se uma redução nos valores de $\Delta E_x = E_x(B = 12 T) - E_x(B = 0 T)$ para SL 2 com o aumento da temperatura.

Capítulo 5

Conclusões

Através de medidas de magnetofotoluminescência, estudamos éxcitons em duas super-redes de $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ presentes em uma única amostra.

O comportamento com o campo magnético da intensidade absoluta, da largura a meia altura e da intensidade integrada dos picos de fotoluminescência para ambas as super-redes nos leva a concluir que o aumento do campo magnético provoca um aumento na probabilidade de recombinações, causado por picos na densidade de estados eletrônicos criados pelo campo magnético.

Investigamos, através da variação das energias de recombinação excitônica, a dimensionalidade aparente dos magneto-éxcitons nas duas super-redes para dois regimes de campos magnéticos: um para baixos valores de \mathbf{B} , quando $\hbar\omega_c < R_y^*$, e outro para campos magnéticos intensos, para o qual $\hbar\omega_c > R_y^*$. Determinamos, através de cálculos autoconsistentes usando os ajustes para os dois regimes de campos magnéticos, os valores da massa efetiva reduzida para os éxcitons a temperaturas menores que 30 K. Para $T > 30$ K, utilizamos um ajuste sem o termo de energia de ligação dos éxcitons na região de campos magnéticos intensos, o que resultou em valores próximos aos encontrados a baixas temperaturas, indicando que para essas temperaturas a ligação elétron-buraco já foi quebrada. O valor médio encontrado para a massa efetiva reduzida foi $\mu^* = (0,052 \pm 0,003)$ para SL 2 na faixa de 4 K a 45 K, independente da temperatura, e $\mu^* = (0,050 \pm 0,005)$ para SL 1 a 4 K.

Utilizando os valores finais de D_2 , calculamos as energias de ligação excitônica em campo magnético nulo para a super-rede SL 2 a temperaturas menores que 30 K e para SL 1 a 4 K. A partir dos valores encontrados podemos concluir que em ambas as estruturas os éxcitons apresentam um caráter tridimensional, sendo essa característica mais acentuada em SL 2. A energia de ligação dos éxcitons diminui com o aumento da

temperatura até a faixa de temperaturas em que esta é da ordem de grandeza da energia térmica (~ 30 K), e a ligação do par elétron-buraco é quebrada. Determinamos também a variação da energia de ligação dos éxcitons como função do campo magnético na faixa de 0 T a 12 T para temperaturas entre 4 K e 20 K para SL 2 e a 4 K para SL 1. Para SL 2 observamos que a diferença $E_x(12 T) - E_x(0 T)$ cai de 6 meV a 4 K para 3 meV a 20 K. Ou seja, com o aumento da temperatura há uma competição entre o efeito do campo magnético e o efeito da energia térmica cedida aos portadores (quebra do éxciton) o que explica a diminuição da diferença $E_x(12 T) - E_x(0 T)$.

Apêndice

Energias permitidas para poços quânticos com o campo magnético perpendicular à direção de crescimento

No Capítulo 2 abordamos os efeitos da aplicação de campos magnéticos paralela e perpendicularmente à direção de crescimento do cristal em semicondutores volumétricos e com poços quânticos.

Em poços quânticos, o caso com o campo magnético aplicado paralelo à direção de crescimento tem uma solução exata. O mesmo não ocorre quando o campo é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento, sendo necessária uma aproximação para encontrar as energias permitidas. Aqui será mostrada a solução completa para esse caso.

Para essa configuração usamos o calibre $\vec{A} = -zB_0\hat{y}$ que leva a $\vec{B} = B_0\hat{x}$, lembrando que \hat{z} é a direção de crescimento.

Com esse calibre, o Hamiltoniano será:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[p_x^2 + (p_y + ezB_0)^2 + p_z^2 \right] + V(z) \quad (\text{A } 1)$$

Como H e p_y comutam, podemos escolher auto-estados comuns para os dois operadores. Temos então duas equações de autovalor:

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (\text{A } 2)$$

$$p_y\psi(x, y, z) = \hbar k_y\psi(x, y, z) \quad (\text{A } 3)$$

Fazendo a separação de variáveis $\psi(x, y, z) \equiv Y(y)\chi(x, z)$, (A 3) pode ser escrita como:

$$-\hbar^2 \chi(x, z) \frac{d^2}{dy^2} Y(y) = \hbar k_y \chi(x, z) Y(y), \quad (\text{A } 4)$$

cuja solução é uma onda plana ao longo da direção y .

Como p_y comuta com H , podemos considerar p_y como uma constante na equação para H . Logo, podemos fazer $p_y = \hbar k_y$ e o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[p_x^2 + e^2 B_0^2 \left(\frac{\hbar k_y}{eB_0} + z \right)^2 + p_z^2 \right] + V(z). \quad (\text{A } 5)$$

Definindo $z_0 \equiv -\frac{\hbar k_y}{eB_0}$, a forma final para o Hamiltoniano será:

$$H = \underbrace{\frac{p_x^2}{2m^*}}_{H_x} + \underbrace{\left\{ \frac{1}{2m^*} \left[p_z^2 + e^2 B_0^2 (z - z_0)^2 \right] + V(z) \right\}}_{H_z}, \quad (\text{A } 6)$$

que é possível separar em duas partes: uma dependendo de x e outra dependendo de z .

Com isso é possível uma nova separação de variáveis $\chi(x, z) \equiv X(x)Z(z)$.

Reescrevendo a equação (A 2), temos:

$$(H_x + H_z) e^{ik_y y} X(x)Z(z) = E e^{ik_y y} X(x)Z(z), \quad (\text{A } 7)$$

que após algumas manipulações, chega à forma:

$$\underbrace{\left[-\frac{1}{X(x)} H_x X(x) + E \right]}_{\varepsilon_x} = \underbrace{\left[\frac{1}{Z(z)} H_z Z(z) \right]}_{\varepsilon_z}. \quad (\text{A } 8)$$

Com isso, a equação em x é

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} X(x) = (E - \varepsilon_x) X(x), \quad (\text{A } 9)$$

cujas autofunções são ondas planas ao longo da direção x . Também de (A 9) podemos tirar que

$$\varepsilon_x = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}. \quad (\text{A } 10)$$

O Hamiltoniano em z pode ser reescrito como

$$H_z = \left[\frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \right] + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} (z - z_0)^2, \quad (\text{A } 11)$$

que não pode ser resolvido analiticamente. A solução é obtida usando teoria de perturbação independente do tempo até primeira ordem, ou seja, tratar o Hamiltoniano como sendo a soma de um termo não perturbado ($H_z^{(0)}$) com outro que é a perturbação ($H_z^{(1)}$). Com isso temos que:

$$H_z^{(0)} = \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \quad \text{e} \quad H_z^{(1)} = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} (z - z_0)^2. \quad (\text{A } 12)$$

Os autovalores de H_z serão $\varepsilon_z = \varepsilon_z^{(0)} + \varepsilon_z^{(1)}$, onde os $\varepsilon_z^{(0)}$ são os autovalores de $H_z^{(0)}$, ou seja, os níveis de energia E_l dos poços sem aplicação de campo magnético. A correção em primeira ordem em energia é obtida fazendo^[2,9] $\varepsilon_z^{(1)} \equiv \langle \psi_n^{(0)} | H_z^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$, onde os $|\psi_n^{(0)}\rangle$ são os auto-estados normalizados do Hamiltoniano não perturbado.

Com isso temos que

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \langle \psi_n^{(0)} | (z - z_0)^2 | \psi_n^{(0)} \rangle. \quad (\text{A } 12)$$

Abrindo a expressão acima, temos:

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \left(\langle \psi_n^{(0)} | z^2 | \psi_n^{(0)} \rangle - 2z_0 \langle \psi_n^{(0)} | z | \psi_n^{(0)} \rangle + z_0^2 \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle \right). \quad (\text{A } 13)$$

Daí,

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \left(\langle z^2 \rangle - 2z_0 \langle z \rangle + z_0^2 \right). \quad (\text{A } 14)$$

Substituindo z_0 , encontramos que

$$\varepsilon_z^{(1)} = \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \langle z^2 \rangle + \frac{eB_0 \hbar k_y}{m^*} \langle z \rangle + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}, \quad (\text{A } 15)$$

onde devemos somar e subtrair $\frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \langle z \rangle^2$ para completar o quadrado com os dois últimos dois termos e deixar a solução na sua forma usual. Assim, a solução final de em H_z será:

$$\varepsilon_z = E_l + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \right) + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_y + eB_0 \langle z \rangle \right)^2. \quad (\text{A } 16)$$

Uma vez que $\varepsilon_x = \varepsilon_z$, podemos usar (A 10) e (A 16) para escrever as energias permitidas para elétrons em uma estrutura de poços quânticos quando o campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento do cristal como sendo:

$$E = E_l + \frac{e^2 B_0^2}{2m^*} \left(\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \right) + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_y + eB_0 \langle z \rangle \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}. \quad (\text{A } 17)$$

Referências

Capítulo 1

[1.1] - J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett*, **66**, 538 (1994).

[1.2] - G. Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco, A. Y. Cho, *Science*, **276**, 773 (1997).

[1.3] - H. Mathieu, P. Lefebvre, P. Christol, *J. Appl. Phys.* **72**, 300 (1992).

[1.4] - X.-F. He, *Phys. Rev. B*, **43**, 2063 (1991).

[1.5] - D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon, K. Woodbridge, *Phys. Rev. B*, **34**, 4002 (1986).

[1.6] - O. Jaschinski, M. Vergöhl, J. Schoenes, A. Schlachetzki, P. Bönsch, *Phys. Rev. B*, **57**, 13086 (1998).

Capítulo 2

[2.1] - L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* (1970).

[2.2] - G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique (1992).

[2.3] - H. T. Grahn (editor), *Semiconductor Superlattices, Growth and Electronic Properties*, World Scientific (1995).

- [2.4] - W. Nakwaski, *Physica B*, **210**, 1 (1995).
- [2.5] - J.-K. Mann, *Festkörperprobleme*, **27**, 137 (1987).
- [2.6] - C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7^a edição, John Wiley & Sons (1996).
- [2.7] - P. L. Gastelois, *Dissertação de Mestrado*, UFMG (1995).
- [2.8] - C. F. Kligshirn, *Semiconductor Optics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1997).
- [2.9] - D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall (1995).
- [2.10] – M. Sugawara, *Phys. Rev. B*, **45**, 11423 (1992).
- [2.11] - R. L. Greene, K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B*, **31**, 6498 (1985).
- [2.12] - X.-F. He, *Phys. Rev. B*, **43**, 2063 (1991).
- [2.13] - H. Mathieu, P. Lefebvre, P. Christol, *J. Appl. Phys.* **72**, 300 (1992).
- [2.14] - D. J. Mowbray, J. Singleton, N. J. Pulsford, S. J. Bass, L. L. Taylor, R. J. Nicholas, W. Hayes, *Superlattices and Microstructures*, **3**, 471 (1987).
- [2.15] - A. Thilagam, *Physica B*, **262**, 390 (1999).
- [2.16] - O. Akimoto, H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn*, **22**, 181 (1967).
- [2.17] - D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon, K. Woodbridge, *Phys. Rev. B*, **34**, 4002 (1986).

Capítulo 3

[3.1] - C. F. Kligshirn, *Semiconductor Optics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1997).

[3.2] - G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique (1992).

[3.3] - K. K. Smith, *Thin Solid Films*, **84**, 171 (1981).

Capítulo 4

[4.1] - M. S. Hybertsen, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 1759 (1991).

[4.2] - I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).

[4.3] - L. C. Poças, J. L. Duarte, I. F. L. Dias, M. Valadares. P. S. S. Guimarães, L. A. Cury, J. C. Harmand, *a ser publicado* (2004).

[4.4] - N. Kotera, E. D. Jones, T. Sakai, T. Kawano, K. Shibata, Y. Mishima, *Microelectronic Engineering*, **63**, 301 (2002).

[4.5] - M. Sugawara, *Phys. Rev. B*, **45**, 11423 (1992).

[4.6] - O. Jaschinski, M. Vergöhl, J. Schoenes, A. Schlachetzki, P. Bönsch, *Phys. Rev. B*, **57**, 13086 (1998).

[4.7] - D. J. Mowbray, J. Singleton, N. J. Pulsford, S. J. Bass, L. L. Taylor, R. J. Nicholas, W. Hayes, *Superlattices and Microstructures*, **3**, 471 (1987).

[4.8] - O. Akimoto, H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn*, 22, 181 (1967).

[4.9] - D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon, K Woodbridge, *Phys. Rev. B*, 34, 4002 (1986).

[4.10] - L. A. Cury, F. M. Matinaga, S. L. S. Freire, M. V. B. Moreira, J. Beerens, M. A. Py, *Superlattices and Microstructures*, 23, 1019 (1998).